



**Національна академія наук України
Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова**

**ПЕТРИК М. Р.
ХІМІЧ О.М.
БОЙКО І.В.
МИХАЛИК Д. М.
ПЕТРИК М.М.
КОВБАШИН В.І.**

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОПЕРЕНОСУ
ТА АДСОРБЦІЇ ВУГЛЕВОДНІВ В НАНОПОРИСТИХ
ЦЕОЛІТНИХ КАТАЛІЗАТОРАХ СИСТЕМ
НЕЙТРАЛІЗАЦІЇ ВІДПРАЦЬОВАНИХ ГАЗІВ**

Київ 2017

**Academie National of Science of Ukraine
V. M. Glushkov Institute of Cybernetics
Termopil Ivan Pulu'j National Technical University**

**PETRYK M. R.
KHIMICH O.M.
BOYKO I.V.
MYKHALYK D. M.
PETRYK M.M.
KOVBASHYN V.I.**

**MATHEMATICAL MODELING OF HEAT TRANSFER
AND ADSORPTION OF CARBOHYDRATES IN
NANOPRODUCTIVE CELLULAR CATALYSTS OF THE
SYSTEMS OF NEUTRALIZATION OF WELDED GASES_e**

Kyiv 2017

УДК 519.6 : 541.18

ББК 519.4

В монографії запропонована методологія моделювання адсорбції, десорбції і теплопереносу вуглеводневих сполук в середовищах нанопористої і неоднорідної структури систем нейтралізації відпрацьованих газів, що описуються неklasичними нелінійними крайовими задачами. Вказані моделі побудовані на основі фундаментальних фізичних постулатів, зокрема нелінійної теорії адсорбційної рівноваги Ленгмюра і Гібса, енергії активації та потенціалу Ленарда-Джонса з урахуванням впливу потоків нано- і макропереносу, різнопористості, тунельного ефекту, структури мікропористих частинок, багатокомпонентності, анізотропії властивостей при врахуванні впливу домішок при компететивній дифузії та інших важливих визначальних фізичних чинників. На основі розвинутих методів лінеаризації нелінійних крайових задач адсорбції по малому параметру, операційного методу Гевісайда, інтегральних перетворень Лапласа, Фурє, Бесселя, методів функцій Коші і Гріна, побудовані високопродуктивних і швидкісні аналітичні розв'язки лінеаризованих задач неізотермічних адсорбції і десорбції для довільного n -го наближення. Запропонований підхід дозволяє ефективно реалізувати висопродуктивні процедури розпаралелювання обчислень при моделюванні вказаних задач і процесів та ідентифікації їх параметрів. Одержані теоретичні результати підтверджуються виконанням чисельних експериментів та порівнянням з експериментально отриманими результатами.

Для наукових працівників, фахівців у галузі математичного моделювання, прикладної математики, теоретичної фізики, програмної інженерії, викладачів вищих навчальних закладів, аспірантів, інженерів та студентів, що цікавляться питаннями створення програмного забезпечення для моделювання фізичних процесів масопереносу, тунелювання та дисипативних ефектів в нанопористих та шаруватих наноструктурах і нанокомпозитах.

Рецензенти

доктор фізико-математичних наук, професор Стоян В.А.

доктор фізико-математичних наук, ст. наук. співр. Галба Є.Ф.

Друкується згідно рішень Вченої ради Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України (протокол № 12 від 28.12.2017р.) та Науково-видавничої ради Національної академії наук України (№ 33/303-1 від 29.12. 2017р.).

ISBN 978-966-02-8423-4

© М.Р. Петрик, О.М. Хіміч, І.В. Бойко,
Д.М. Михалик, М.М. Петрик, В.І. Ковбашин, 2017

ЗМІСТ

| | |
|--|----|
| ЗМІСТ | 4 |
| ВСТУП..... | 7 |
| Розділ 1 Фізичні основи адсорбції і десорбції..... | 9 |
| 1.1. Адсорбція і хемосорбція | 9 |
| 1.2. Сили та енергії адсорбції | 10 |
| 1.2.1. Енергія розсіювання-відштовхування | 10 |
| 1.2.2. Електростатичні енергії | 13 |
| 1.2.2. Теплота адсорбції при першому наближенні | 14 |
| 1.3. Теоретичні розрахунки теплоти адсорбції..... | 15 |
| 1.3.1. Неполарні адсорбенти..... | 15 |
| 1.3.2. Цеоліти..... | 18 |
| 1.3.3. Величина відносного впливу електростатичної енергії та енергії розсіювання | 20 |
| 1.4. Адсорбція на низькому рівні: закон Генрі | 25 |
| 1.4.1. Теоретичний розрахунок констант Генрі..... | 27 |
| 1.4.2. Обмежене обертання | 30 |
| 1.5. Одно- та багат шарова адсорбція..... | 31 |
| 1.5.1. Ізотерма Ленгмюра | 32 |
| 1.5.2. Ізотерма ВЕТ | 35 |
| Список джерел до розділу 1 | 38 |
| Розділ 2 Термодинаміка адсорбції..... | 40 |
| 2.1. Термодинаміка адсорбованої фази | 40 |
| 2.1.1. Класична рівноважність..... | 40 |
| 2.1.2. Тиск розширення | 42 |
| 2.1.3. Ізотерма адсорбції Гіббса | 45 |
| 2.2. Отримання рівнянь ізотерм з рівняння Гіббса | 46 |
| 2.2.1. Правило Генрі | 46 |
| 2.2.2. Ізотерма Ленгмюра | 47 |
| 2.2.3. Ізотерма Вольмера | 47 |
| 2.2.4. Ізотерма Ван дер Ваальса | 47 |
| 2.2.5. Ізотерма віріалу | 48 |
| 2.3. Адсорбція сумішей..... | 49 |
| 2.3.1. Підхід Меєрса і Праушніца | 49 |
| 2.3.2. Теорія розв'язування вакансій | 51 |
| 2.4. Статистичний термодинамічний підхід | 54 |
| 2.4.1. Елементарне статистичне визначення ізотерми Ленгмюра | 55 |
| 2.4.2. Застосування "Функції великого канонічного розподілу" | 55 |
| 2.4.3. Проста статистична модель ізотерм для цеолітів | 57 |
| 2.5. Кореляція, аналіз, і прогноз адсорбційної рівноваги..... | 61 |
| 2.5.1. Локалізована адсорбція..... | 62 |
| 2.5.2. Мобільна адсорбція | 65 |
| 2.5.3. Загальна статистична кореляція..... | 70 |

| | |
|---|-----|
| Список джерел до розділу 2 | 72 |
| Розділ 3 Методи математичного моделювання в задачах дифузійного масопереносу та адсорбції в однорідних і неоднорідних багатоскладових нанопористих середовищах | 74 |
| 3.1. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для однорідних середовищ переносу | 74 |
| 3.1.1. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для обмежених середовищ переносу | 74 |
| 3.1.2. Інтегральні перетворення Фур'є для напівобмежених однорідних середовищ переносу | 80 |
| 3.2. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для обмежених неоднорідних n-складових середовищ переносу | 83 |
| 3.3. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для напівобмежених неоднорідних n-складових середовищ переносу | 100 |
| 3.4. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для необмежених неоднорідних середовищ переносу | 118 |
| 3.5. Скінченні інтегральні перетворення типу Ганкеля 1-го роду для однорідних циліндричних середовищ переносу | 132 |
| 3.6. Скінченні гібридні інтегральні перетворення типу Ганкеля 2-го роду для обмежених неоднорідних n-складових циліндричних середовищ з симетричною напівпроникною порожниною | 136 |
| 3.7. Гібридні інтегральні перетворення типу Фур'є-Бесселя для обмежених двоскладових циліндричних середовищ переносу | 141 |
| 3.8. Гібридні інтегральні перетворення типу Фур'є-Бесселя для необмежених неоднорідних n-складових циліндричних середовищ переносу | 155 |
| 3.9. Гібридні інтегральні перетворення типу Вебера для необмежених однорідних циліндричних середовищ із симетричною порожниною | 169 |
| 3.10. Моделювання систем масопереносу в багатовимірному і неоднорідному по декількох напрямках середовищі | 174 |
| 3.11. Моделювання неоднорідних В-параболічних задач масопереносу з узагальненими крайовими та інтерфейсними умовами для циліндричних багатокомпонентних середовищ | 177 |
| 3.12. Двовимірна циліндрична неоднорідна задача багатокомпонентних систем переносу | 180 |
| Список джерел до розділу 3 | 183 |
| Розділ 4 Методи математичного моделювання в задачах рівноважного дифузії та адсорбції в неоднорідних багатокомпонентних циліндричних нанопористих середовищах | 186 |
| 4.1. Методологія побудови розв'язків крайових задач адсорбції в обмежених неоднорідних циліндричних нанопористих середовищах | 186 |
| 4.1.1. Постановка нелінійної крайової задачі адсорбції в неоднорідному циліндричному нанопористому середовищі | 186 |
| 4.1.2. Схема лінеаризації нелінійної циліндричної моделі | 187 |
| 4.1.3. Побудова розв'язку лінеаризованої системи задач | 189 |

| | |
|---|-----|
| 4.2. Методологія побудови розв'язків крайових задач адсорбції в обмежених неоднорідних циліндричних нанопористих середовищах із симетричною порожниною | 198 |
| 4.3. Методологія побудови розв'язків крайових задач адсорбції в необмежених неоднорідних циліндричних нанопористих середовищах | 207 |
| 4.4. Методологія побудови розв'язків крайових задач адсорбції в необмежених неоднорідних циліндричних нанопористих середовищах з симетричною порожниною | 217 |
| Список джерел до розділу 4 | 227 |
| Розділ 5 Моделювання нелінійних неізотермічних процесів адсорбції та десорбції вуглеводнів в нанопористих каталітичних системах | 229 |
| 5.1. Моделювання тепломасопереносу, адсорбції і десорбції вуглеводнів в нанопористих цеоліт-каталізаторах систем нейтралізації викидних газів..... | 229 |
| 5.1.1. Математична модель циклічних фаз неізотермічної адсорбції і десорбції в середовищі нанопористих частинок | 229 |
| 5.1.2. Побудова аналітичного розв'язку моделі | 231 |
| 5.1.3. Комп'ютерне моделювання та аналіз параметрів процесів адсорбції і десорбції цеоліт-каталізаторах систем нейтралізації викидних газів | 236 |
| 5.1.4. Дегідратація природного газу, як моторного пального. Дослідження та моделювання фаз адсорбції та десорбції..... | 239 |
| 5.2. Моделювання адсорбції і десорбції вуглеводнів в нанопористих каталізаторах систем нейтралізації викидних газів з використанням нелінійної ізотерми Ленгмюра..... | 245 |
| 5.2.1. Нелінійна математична модель неізотермічної адсорбції та десорбції в середовищі мікропористих частинок | 245 |
| 5.2.2. Схема лінеаризації нелінійної моделі..... | 248 |
| 5.2.3. Методика побудови аналітичного розв'язку неоднорідної крайової задачі нульового наближення | 251 |
| 5.2.4. Методика побудови аналітичних розв'язків неоднорідних крайових задач n -го наближення..... | 254 |
| 5.3. Моделювання адсорбції та десорбції вуглеводнів в нанопористих каталітичних цеоліт-середовищах з врахуванням нелінійної ізотерми Ленгмюра та енергії активації адсорбенту | 256 |
| 5.3.1. Нелінійна математична модель неізотермічних адсорбції та десорбції на основі узагальненої ізотерми Ленгмюра | 256 |
| 5.3.2. Схема лінеаризації нелінійної моделі..... | 259 |
| 5.3.3. Методика побудова аналітичного розв'язку неоднорідної крайової задачі нульового наближення | 260 |
| 5.3.4. Методика побудови аналітичних розв'язків неоднорідних | 263 |
| 5.3.5. Комп'ютерне моделювання. Аналіз розподілів концентрації адсорбтиву в газовій фазі і нанопорах цеоліту та температур | 267 |
| Список джерел до розділу 5 | 272 |
| INTRODUCTION | 275 |
| TABLE OF CONTENT | 277 |

ВСТУП

Розробка ефективних математичних моделей дослідження кінетики процесів тепломасопереносу вуглеводнів, що протікають в нано- і макро порах цеоліт-каталізаторів систем нейтралізації викидних газів є важливим завданням, що сприяє зниження основних джерел викидів в атмосферу об'єктів виробництва енергії і транспорту. Викиди автотранспорту та об'єктів теплової енергетики, кількість яких стрімко збільшується, особливо у великих містах та промислових центрах, сьогодні складають найбільшу загрозу довкіллю та здоров'ю людей, наближаючи процес глобального потепління. Визначені пріоритетні напрями досліджень Програмою Європейського Союзу «Горизонт 2020» на сьогодні акцентують увагу на створення кіберфізичних систем безпечної енергетики і транспорту, що ґрунтуються на створенні нових технологічних рішень на основі нових каталітичних адсорбційних процесів та нанопористих адсорбційних матеріалів, здатних ефективно утилізувати шкідливі викиди вуглецевих сполук в атмосферу цими об'єктами та досягти суттєвих показників зниження глобального потепління.

В монографії запропонована методологія моделювання адсорбції, десорбції вуглеводневих сполук в середовищах нанопористої і неоднорідної структури систем нейтралізації відпрацьованих газів, що описуються некласичними нелінійними крайовими задачами.

В першому і другому розділах описані фізичні основи та термодинаміка процесів адсорбції і десорбції з стосовно їх використання для побудови нових математичних моделей, що описуватимуть технологічні нанопроцеси адсорбції і десорбції вуглеводневих сполук в середовищах нанопористої структури для систем нейтралізації відпрацьованих газів. Необхідні математичні моделі досліджуваних об'єктів повинні формуватись на основі фундаментальних фізичних постулатів і законів переносу в нанопористих середовищах, зокрема нелінійної теорії адсорбційної рівноваги Ленгмюра і Гібса, енергії активації та потенціалу Ленарда-Джонса з урахуванням впливу потоків нано- і макропереносу, різнопористості, тунельного ефекту, структури мікропористих частинок, багатокomпонентності, анізотропії властивостей при врахуванні впливу домішок при компететивній дифузії та інших важливих визначальних фізичних чинників.

У третьому розділі подані методи математичного моделювання в задачах дифузійного масопереносу та адсорбції в однорідних і неоднорідних багатоскладових нанопористих середовищах на основі розвинутих нами обчислювальних схем реалізації інтегральних перетворень Фре, Бесселя, Ганкеля для неоднорідних плоских і циліндричних середовищ.

Четвертий розділ присвячений розробці методів математичного моделювання і обчислювальних процедур, включаючи розпаралелювання обчислень в задачах моделювання рівноважних сусідніх процесів дифузії та адсорбції в неоднорідних багатокомпонентних циліндричних нанопористих середовищах з використанням операційного методу Гевісайда та інтегрального перетворення Лапласа.

У п'ятому розділі на основі розвинутих методів лінеаризації нелінійних крайових задач адсорбції по малому параметру, операційного методу Гевісайда, інтегральних перетворень Лапласа методів функцій Коші і Гріна, побудовані високопродуктивних і швидкісні аналітичні розв'язки лінеаризованих задач неізотермічних адсорбції і десорбції для довільного n -го наближення. Запропонований підхід дозволяє ефективно реалізувати високопродуктивні процедури розпаралелювання обчислень при моделюванні вказаних задач і процесів та ідентифікації їх параметрів.

Отримані теоретичні та практичні результати включають якісні оцінки розподілів концентраційних і температурних полів для циклічних фаз адсорбції та десорбції реальних процесів (адсорбції пропану та парів води), побудованих ізотерм адсорбції для цеоліту типу ZSM-5, що підтверджується виконанням чисельних експериментів та порівнянням з експериментально отриманими результатами.

РОЗДІЛ 1

ФІЗИЧНІ ОСНОВИ АДСОРБЦІЇ І ДЕСОРБЦІЇ

1.1. Адсорбція і хемосорбція

При обговоренні основ адсорбції, важливим аспектом розуміння таких процесів є необхідність розрізняти фізичну адсорбцію, що визначається відносно слабкими міжмолекулярними силами, і хемосорбцію, яка, за своїм механізмом, передбачає утворення хімічного зв'язку між молекулою сорбату та поверхнею адсорбенту [1]. Не зважаючи на те, виділення різниці у суті фізичних процесів є концептуально корисним, існує багато проміжних випадків, коли не завжди можна однозначно класифікувати певну систему. Виділені загальні ознаки, що відрізняють фізичну адсорбцію та хемосорбцію, є наступними [1-3]:

| Фізична адсорбція | Хемосорбція |
|---|--|
| Низька теплота адсорбції (менше 2-3 значень енергії фазового переходу) Не специфічний процес. | Висока теплота адсорбції (більше 2-3 значень енергії фазового переходу) Дуже специфічний процес. |
| Моношарові або багатошарові структури. Немає дисоціації адсорбованої речовини. Відбувається при відносно низьких температурах. | Тільки моношарові структури. Можуть утворюватися дислокації. Може відбуватися у широкому діапазоні температур. |
| Процес швидкий, неактивований, оборотний. Перенесення електронів відсутнє, може мати місце поляризація сорбату. | Активований процес, може бути повільним і незворотним. Має місце електронний перенос, який веде до утворення зв'язку між сорбатом і поверхнею. |

Практично всі процеси адсорбційного розділення залежать від фізичної адсорбції, а не від хемосорбції. Розрахунок теплоти адсорбції забезпечує пряму оцінку зв'язків між сорбатом і поверхнею. Фізична адсорбція з газової фази завжди є екзотермічною, що може бути показано з використанням простого термодинамічного підходу [3]. Оскільки адсорбована молекула має на поверхні сорбату не більше двох ступенів поступальної свободи, та з урахуванням того, що оберտальна свобода адсорбованих частинок повинна бути завжди менше, ніж у

молекули газової фази, зміна ентропії при адсорбції ($\Delta S = S_{\text{ads}} - S_{\text{gas}}$) у всіх випадках буде мати від'ємний знак. Для того, щоб відбувалася суттєва адсорбція, зміна вільної енергії при адсорбції (ΔG) також має бути від'ємною і оскільки $\Delta G = \Delta H - T\Delta S$ це означає, що $\Delta H < 0$ або все одно, що адсорбція є екзотермічним процесом. Даний факт, як правило, є справедливим і для адсорбції з рідкої фази, проте ці цьому випадку також можливі і винятки.

1.2. Сили та енергії адсорбції

Сили, які визначають процеси фізичної адсорбції, включають сили ван-дер-Ваальса (дисперсійне відштовхування) та сили електростатичної взаємодії, що включають поляризацію, дипольну і квадрупольну взаємодію. Вплив сил ван-дер-Ваальса завжди є суттєвим, при цьому внески електростатичних сил є значними лише у випадку з адсорбентами, такими як цеоліти, які мають іонну структуру [2, 3]. Для сорбції дрібних дипольних молекул, таких як H_2O та NH_3 за допомогою цеолітних адсорбентів, вплив електростатичних сил може бути дуже великим, що спричиняє надзвичайно високі значення кількості теплоти адсорбції (25-30 ккал/моль). Таким чином, хоча такі взаємодії загалом розглядаються як процеси фізичної адсорбції, теплота адсорбції цілком може мати походження, яке загалом пов'язане з хемосорбцією. Крім того, в таких системах адсорбція носить досить специфічний характер, і її швидкість контролюється десятками процесами активованого дифузії, що призводить до появи повільно активованої хемосорбції, навіть якщо реальна адсорбція з поверхні може бути швидкою [3]. Таким чином, такі системи, виявляють багато характерних рис, в загальному випадку пов'язаних з хемосорбцією.

1.2.1. Енергія розсіювання-відштовхування

Ефективний потенціал, який виникає внаслідок існування сили дисперсії між двома окремими молекулами, може бути записаний у формі [1-3]:

$$\varphi_D = -\frac{A_1}{r_{12}^6} - \frac{A_2}{r_{12}^8} - \frac{A_3}{r_{12}^{10}}. \quad (1.1)$$

де r_{12} - відстань між центрами взаємодіючих молекул, а A_1 , A_2 , A_3 - силові константи. Перший член в цьому виразі, який завжди дає найбільший вплив, описує взаємодію між миттєвими індукованими диполями. Другий та третій доданки - відповідно індуковані дипольні квадрупольні та індуковані квадрупольні взаємодії.

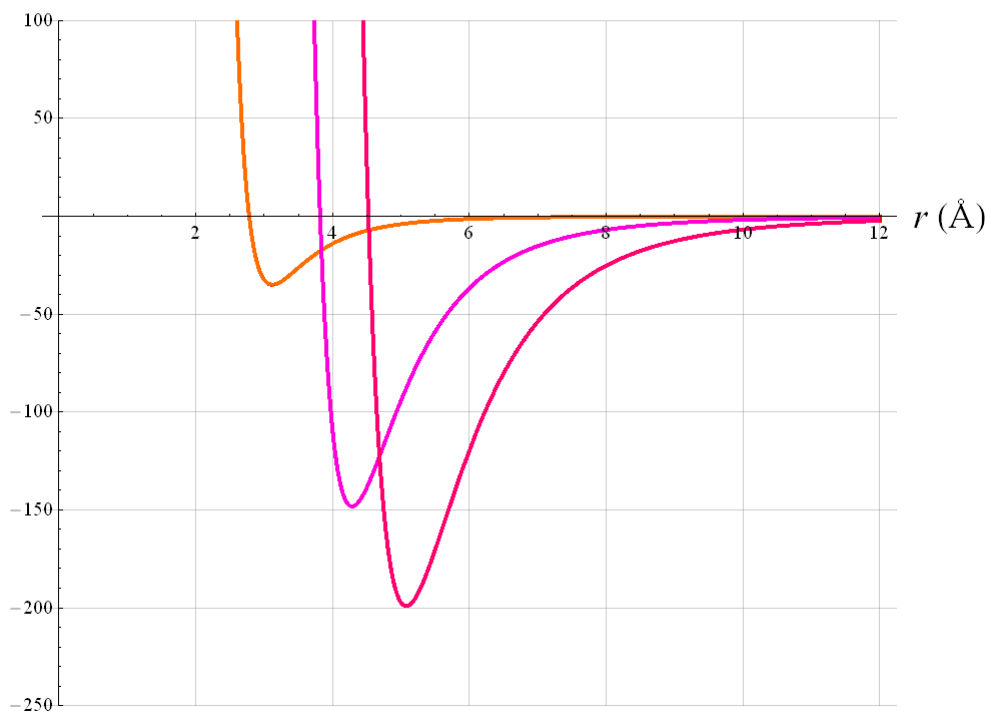


Рисунок 1.1. Потенціал Леонарда-Джонса для неону (Ne), метану (CH₄), етану (C₂H₆)

Енергія, що характеризує відштовхування між молекулами на близьких відстанях між ними, яка спричинена кінцевих розмірів молекул, зазвичай представляється напівемпіричним степеневим співвідношенням [2]:

$$\varphi_R = \frac{B}{r_{12}^{12}} \quad (1.2)$$

Нехтуючи складовими вищого порядку до енергії дисперсії та об'єднуючи потенціал взаємного притягання шостого степеню з потенціалом взаємного відштовхування дванадцятого порядку, приходимо до знайомої потенціальної функції Ленарда-Джонса [2]:

$$\varphi = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1.3)$$

схематично зображеної на рис. 1.1. Силкові константи ε і σ є характеристиками певного сорту молекул (одно-, дво- та багатоатомних) та табличними обчислюваними значеннями для багатьох поширених молекул. Ці значення можуть бути отримані як з транспортних властивостей (в'язкість, теплопровідність), так і від безпосередніх вимірів відхилення від законів ідеальних газів (другий віріальний коефіцієнт). Для більшості малих молекул значення, отримані двома способами, добре узгоджуються між собою. Взаємодія між двома різними молекулами між собою представляється середнім арифметичним значенням σ та середнім геометричним значенням ε [2]:

$$\sigma_{12} = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2), \quad \varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1 \varepsilon_2} \quad (1.4)$$

Умова $d\varphi/dr = 0$ з використанням рівняння. (1.3) дає для рівноважного розміщення між центрами ізолюваної пари молекул, $\sigma_0 = 2^{1/6}\sigma$. Таким чином, виключений об'єм (Ван-дер-ваальсівський об'єм b) має бути в чотири рази більшим фактичного об'єму молекул:

$$b = \frac{4}{3}\pi \frac{\sigma_0^3}{2} = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{\sigma_0}{2}\right)^3 \times 4. \quad (1.5)$$

Для оцінки сили розсіювання-відштовхування для більших молекул, для яких табличні значення силових констант Ленарда-Джонса невідомі, зазвичай зберігається загальна форма рівняння. (1.3), але з заміною констант притягання та відштовхування ($4\varepsilon\sigma^6$ і $4\varepsilon\sigma^{12}$) їх відповідними напівемпіричними константами A і B [3]:

$$\varphi = -\frac{A}{r^6} + \frac{B}{r^{12}}. \quad (1.6)$$

Є три загальноприйняті вирази, доступні для оцінки константи притягання [3-8]:
вираз Лондона [4, 5]:

$$A_L = \frac{3}{2}\alpha_1\alpha_2 I, \quad \frac{1}{I} = \frac{1}{I_1} + \frac{1}{I_2}, \quad (1.7)$$

вираз Слейтера-Кірквуда [6]:

$$A_{S-K} = \frac{3eh}{4\pi\sqrt{m}} \frac{\alpha_1\alpha_2}{(\sqrt{\alpha_1/N_1} + \sqrt{\alpha_2/N_2})}, \quad (1.8)$$

вираз Кірквуда-Мюллера [7, 8]:

$$A_{K-M} = 6mc^2 \frac{a_1 a_2}{(a_1/x_1) + (a_1/x_1)}. \quad (1.9)$$

У цих виразах використовуються наступні позначення:

c - швидкість світла у вакуумі;

e - заряд електрона, m - mass of electron;

h - стала планка;

I_1, I_2 - іонізаційні потенціали;

α_1, α_2 - поляризованості молекул 1 і 2;

χ_1, χ_2 - магнітні сприйнятливості молекул 1 і 2;

N_1, N_2 - кількість електронів у зовнішніх оболонках молекул 1 і 2;

У рівноважному положенні (r_0): $d\varphi/dr = 0$, звідки:

$$\frac{d\varphi}{dr} = \frac{6A}{r_0^7} - \frac{12B}{r_0^{13}} = 0, \quad B = \frac{Ar_0^6}{2}. \quad (1.10)$$

Значення константи відштовхування B можна, таким чином, оцінювати, розраховуючи r_0 , що дорівнює середньому значенню ван-дер-ваальсівських радіусів взаємодіючих молекул. Проте, як видно з таблиці 2.1, значення константи розсіювання, що оцінюються за рівняннями. (1.7) - (1.9) не підходять навіть для простих молекул, таких як рідкі гази, хоча всі три вирази дають значення правильного порядку величини [8].

Таблиця 2.1. Порівняння розрахованих констант розсіювання для інертних газів та метану, розрахованого за рівняннями. (1.7) - (1.9) та констант Ленарда-Джонса ($\text{ерг}\cdot\text{см}^6$) [7-8]

| | $A_L \times 10^{60}$ | $A_{K-M} \times 10^{60}$ | $A_{S-K} \times 10^{60}$ | $A_{L-J} = 4\epsilon\sigma^6 \times 10^{60}$ |
|-----------------|----------------------|--------------------------|--------------------------|--|
| Ne | 4 | 11 | 8.7 | 10 |
| Ar | 50 | 125 | 73 | 111 |
| Kr | 102 | 289 | 205 | 191 |
| Xe | 233 | 698 | 422 | 496 |
| CH ₄ | 105 | 188 | 145 | 231 |

Вираз Слейтера-Кірквуда дає найкращу оцінку для Ne, Kr і Xe, тоді як вираз Кірквуда-Мюллера дає кращі значення для Ar і CH₄. Погана застосовність виразів, запропонованих для оцінки силових констант, є серйозною перешкодою для побудови кількісного теоретичного підходу до безпосереднього розрахунку енергій адсорбції. Проте, проблема не настільки ж важка, як може здатися на перший погляд, оскільки обчислення констант відштовхування відповідно до рівняння (1.10) означає, що в значній мірі помилки в розрахунку A та B компенсуються за умови, що значення, яке використовується для r_0 , є достатньо точним.

Сили, визначаючі розсіювання є адитивними, і тому в принципі можна обчислити енергію взаємодії для адсорбованої молекули, виконуючи підсумовування енергій попарної взаємодії, що виникають при взаємодії молекул адсорбату з кожним атомом адсорбенту. Такий підхід широко використовується. Хоча адитивність енергій розсіювання завжди справедлива, звідси не обов'язково випливає, що впливи сил відштовхування також є адитивними, хоча таке припущення здійснюється в теоретичних розрахунках і моделюванні такого роду [4-8].

1.2.2. Електростатичні енергії

У іонних адсорбентах, таких як цеоліти, де в області їх поверхні є значне електричне поле, додаткові внески до енергії адсорбції можуть виникати з

поляризації (φ_ρ), польово-дипольної (φ_μ), та польово-квадрупольної (φ_Q) взаємодій. Вони можуть бути подані наступними виразами [5-8]:

$$\begin{aligned}\varphi_\rho &= -\frac{1}{2}\alpha E^2; \\ \varphi_\mu &= -\mu E; \\ \varphi_Q &= -\frac{1}{2}Q \frac{\partial E}{\partial r}\end{aligned}\tag{1.11}$$

де E - електричне поле, α - поляризованість, μ - дипольний, Q - квадрупольний момент, який визначається виразом:

$$Q = \frac{1}{2} \int q(\rho, \theta) (3 \cos^2 \theta - 1) \rho^2 dV, \tag{1.12}$$

$q(\rho, \theta)$ - локальна густина заряду в точці (ρ, θ) з початком в центрі молекули, а інтегрування здійснюється по всьому об'єму молекули. Таким чином, для іонного адсорбенту загальний потенціал визначається сумою шести компонент:

$$\varphi = \varphi_D + \varphi_R + \varphi_P + \varphi_\mu + \varphi_Q + \varphi_s \tag{1.13}$$

де φ_s - компонента, що характеризує вплив адсорбат-адсорбатної взаємодії.

1.2.2. Теплота адсорбції при першому наближенні

У першому наближенні можна знехтувати будь-якими ефекти взаємодії між сусідніми адсорбованими молекулами. У цих умовах існує просте співвідношення між середньою потенціальною енергією ($\bar{\varphi}$) та теплотою сорбції, яке можна тримати наступним чином [5-8]:

- Внутрішня енергія для 1 моля адсорбату у газовій фазі U_g ;
- Молярна ентальпія адсорбату у газовій фазі (для ідеального газу) : $U_g + RT$;
- Молярна ентальпія для адсорбованої фази: $U_s + \bar{\varphi}$
- Ізотермічна теплота сорбції: $-\Delta H_0 = U_g - U_s + RT - \bar{\varphi}$, де

$U_g - U_s$ - це різниця між кінетичними енергіями молекули адсорбату в газоподібному та адсорбованому станах, що внаслідок цього залежить від природи адсорбованої фази [5-7].

Використовуючи принцип рівномірного розподілу енергії за степенями вільності, маємо:

$$\begin{aligned}U_g - U_s &= \frac{nRT}{2}; \\ -\Delta H_0 &= -\bar{\varphi} + RT(1 + n/2)\end{aligned}\tag{1.14}$$

де n - різниця у кількості ступенів свободи між газоподібною та адсорбованою фазами. Якщо внутрішні ступені свободи не впливають на процес сорбції, то

адсорбована фаза буде поводити себе як сукупність локалізованих тривимірних осциляторів [8]: $n = 3 - 6 = -3$,

$$U_g - U_s = -3kT/2, -\Delta H_0 = \bar{\varphi} - RT/2.$$

Якщо адсорбована фаза має трансляційну свободу в двох вимірах (у площині поверхні) з одним ступенем коливальної свободи (перпендикулярно поверхні), то [14]: $n = 3 - 4 = -1$; $U_g - U_s = RT/2$; $-\Delta H_0 = \bar{\varphi} - RT/2$.

У більшості випадків невеликою поправкою, що виникає внаслідок різних значень кінетичної енергії, можна знехтувати і тоді в цьому наближенні: $\bar{\varphi} \approx \Delta H$.

Значення $\bar{\varphi}$ в цих рівняннях дійсно повинно бути середньою величиною φ , розрахованим шляхом інтегрування за всіма можливими положеннями молекули сорбату [8]. На практиці, за винятком дуже високих температур, молекули в основному знаходяться поблизу потенціальних мінімумів, тому добрим наближенням є:

$$\bar{\varphi} \approx \bar{\varphi}_{\min} \approx \Delta H. \quad (1.15)$$

1.3. Теоретичні розрахунки теплоти адсорбції

1.3.1. Неполарні адсорбенти

Для неполярного адсорбенту відсутні дипольні та квадрупольні внески до енергії адсорбції, тому якщо знехтувати невеликим внеском від енергії поляризації знехтувати, потенціал, а отже, і теплота адсорбції, може бути розрахований шляхом підсумовування внесків розсіювання та відштовхування від кожного атома в адсорбент [7]. В першому наближенні нехтуватимемо членами вищого порядку в рівнянні. (1.1) і розглянемо потенціал, який буде представляється доданком шостого степеня для сили притягання та доданком для сили відштовхування дванадцятого порядку. Константа відштовхування оцінюється відповідно до рівняння (1.10), з рівноважного положення (r_0) для молекули сорбату та ізолюваного атома адсорбенту; у свою чергу r_0 визначається як середнє значення Ван дер Ваальса, або безпосередньо з параметрів Ленарда-Джонса [3, 5, 9]. Отриманий вираз для потенціалу має вигляд:

$$\varphi = -A \left(\frac{1}{r^6} - \frac{r_0^6}{2r^{12}} \right). \quad (1.16)$$

Константа A може бути оцінена відповідно до рівнянь. (1.7) - (1.9). Для розрахунку потенціального профілю, нормального до поверхні адсорбенту, вважається, що молекула сорбату розташована на фіксованій відстані від поверхні, а внески в потенціал, що виникають від кожного атома в твердому тілі, потім розраховуються відповідно до рівняння (1.16) і підсумовуються [7]. При

виконанні цього підсумовування для спрощення розрахунку може бути використана низка наближень. Найпростішим наближенням є розглядання твердого тіла у моделі рівномірного континууму з певною густиною атомів, що замінює дискретне підсумовування інтегруванням [8]. Такий підхід є дещо грубим наближенням, оскільки у ньому сильно занижується вплив у сумарний потенціал атомів у приповерхневому шарі. Значне збільшення точності можна досягти шляхом обробки шарів атомів у твердому тілі окремо, але можна уважати, що кожний шар має певну густину атомів на одиницю площі і, таким чином, замінити підсумовування для кожного шару інтегралом, як показано на рис. 1.2 [7-9]. Щоб отримати потенціальний профіль, нормальний до поверхні, розрахунок виконується для окремої молекули, розташованої на змінній відстані від поверхні (z). Отриманий потенціальний профіль має мінімум на відстані від поверхні, що є значно меншою від r_0 , а величина потенціалу при цьому мінімумі дає гарне наближення до граничної теплоти адсорбції [рівняння (1.15)]. Такі розрахунки для різних газів при адсорбції на графіті виконувалися багатьма дослідниками.

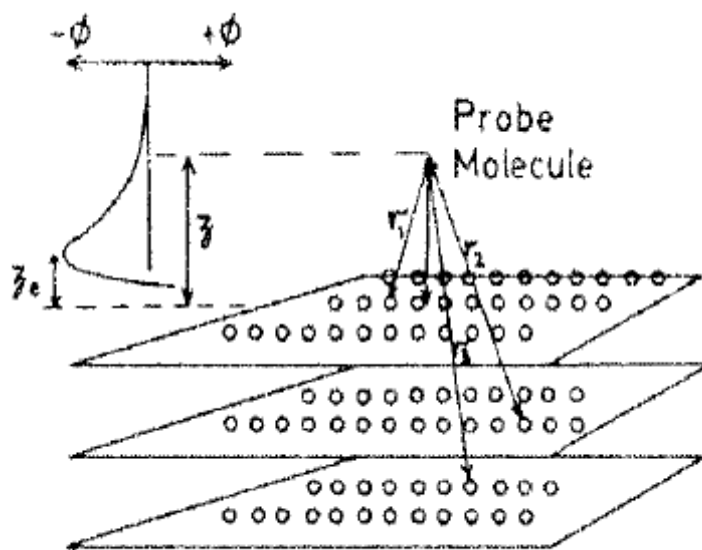


Рисунок 1.2. Схематична діаграма, що показує потенціал для окремої молекули, що наближається до поверхні кристалічного тіла

Хороші результати був тримані Россом і Олів'є (9) [7-9]. Результати розрахунків, виконаних за кількома різними наближеннями, наведені у табл. 1.3 [3-9]. Точніші розрахунки (прямого підсумовування решітки або послідовної інтеграції) дають достатньо точні наближення до експериментальних випромінювань адсорбції.

Для розрахунку профілю необхідно підсумувати парні взаємодії молекули зонда з кожним атомом твердого тіла. (на рис. 1.2. показано тільки перші три атомних шари твердого тіла).

Таблиця 1.2. Параметри, використані при розрахунку розсіювально-відштовхувальних потенціалів інертних газів на графіті [9]

| | C | Ne | Ar | Kr | Xe |
|---|------|-------|-------|-------|------|
| $\sigma_0(\text{Å})$ | 1.7 | 1.59 | 1.91 | 2.01 | 2.25 |
| $z_l(\text{Å})$ | — | 3.29 | 3.61 | 3.71 | 3.95 |
| $x \times 10^3(\text{см}^3)$ | 10.5 | 12.0 | 32.2 | 46.5 | 71.5 |
| $x \times 10^{24}(\text{см}^3)$ | 0.94 | 0.4 | 1.63 | 2.48 | 4.0 |
| $A_1 \times 10^{45}(\text{ккал} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{см}^6)$ | — | 0.214 | 0.77 | 1.15 | 1.82 |
| $A_2 \times 10^{60}(\text{ккал} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{см}^8)$ | — | 0.026 | 0.104 | 0.157 | 0.25 |
| $A_3 \times 10^{76}(\text{ккал} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{см}^{10})$ | - | 0.04 | 0.17 | 0.31 | 0.43 |

Таблиця 1.3. Порівняння експериментальних значень теплоти адсорбції (ккал/моль) для інертних газів на графіті з дисперсійними потенціалами, розрахованими за різними наближеннями

| | Ne | Ar | Kr | Xe |
|--|------|------|------|-----|
| Експериментальне значення теплоти сорбції | 0.74 | 2.12 | 2.8 | 3.7 |
| Теоретичне значення φ_{\min} розраховане як: | 0.76 | 1.92 | 2.6 | 3.2 |
| (i) Послідовне підсумовування 6-8-10-12 потенціалів | | | | |
| (ii) Послідовне підсумовування 6-12 потенціалів | 0.73 | 1.84 | 2.48 | 3.1 |
| (iii) Пряме підсумовування решітки | 0.91 | 2.22 | 2.95 | - |
| (iv) Інтегрування потенціалів в моделі твердого тіла як однорідного континууму | 0.23 | 0.64 | 0.88 | 1.2 |

Аналогічні розрахунки можуть бути виконані і для адсорбції складніших молекул, проте при цьому все важче оцінити надійні значення силових констант. Такі розрахунки підтверджують достовірність основної теорії фізичної адсорбції, але при цьому мають обмежену кількісну або прогностичну цінність, оскільки в загальному випадку неможливо оцінити константи розсіювання з досить високою точністю для того, щоб отримані результати мали практичну корисність.

1.3.2. Цеоліти

Теплота сорбції для багатоатомних газів на цеолітових сорбентах можна розраховувати по суті так само, як і для сорбції на графіті, проте розрахунок складніше, тому що слід враховувати взаємодію з кількома різними типами іонів решітки [10-13]. Крім того, внаслідок сильного електричного поля вплив енергії поляризації має такий же порядок, як і енергія розсіювання, і ним не можна знехтувати. Це означає, що, як і обчислення впливів розсіювання-відштовхування для пробної молекули, необхідно розрахувати електричне поле в кожній точці, а потім оцінити енергію поляризації з рівняння (1.11) [10-12]. Такі розрахунки були виконані декількома дослідниками [10-13], а результати подані в табл. 1.4.

Табл. 1.4. Порівняння експериментальних значень граничної теплоти адсорбції (ккал/моль) з теоретичними значеннями розрахованих потенціалів

| Теоретичні значення - $\bar{\phi}$ | | | | | |
|---|-----------------|--------------------------------|---|-------|--------------|
| адорбат | $(-\Delta H)_s$ | Лондон рівн. (1.7) | S-K (1.8)] | Рівн. | К-М (1.9) |
| <i>Інертні гази на 5A Цеоліті –Дерра і Рутвен [14]</i> | | | | | |
| Ar | 3.36 | <u>2.9</u> | 4.25 | | 5.21 |
| Kr | 4.24 | 3.52 | <u>4.3</u> | | 6.06 |
| Xe | 5.4 | 3.62 | <u>5.05</u> | | 7.8 |
| | | | | | |
| Сорбат | Цеоліт | Експеримент $(-\Delta H)_s$ | Теоретичний розрахунок - $\bar{\phi}$ (К-М) | | |
| <i>Інертні гази на різних формах цеоліту X. Брюмер та ін [12]</i> | | | | | |
| Ar | LiX | 3.3 | 3.4 | | |
| | NaX | 2.8 | 3.04 | | |
| | KX | 3.0 | 3.2 | | |
| | CaX | 5.0 | 4.7 | | |
| | SrX | 3.8 | 3.9 | | |
| | BaX | 3.3 | 3.2 | | |
| Kr | LiX | 3.8 | 4.75 | | |
| | NaX | 4.4 | 4.42 | | |
| | KX | 4.7 | 4.57 | | |
| Xe | LiX | 4.9-5.4 | 7.86 | | |
| | NaX | 5.5-5.7 | 7.67 | | |
| | KX | 5.4-5.9 | 7.95 | | |

Дерра та Рутвен [14] виконали свої розрахунки для SA цеоліту за допомогою простого потенціалу 6-12 для енергії розсіювання при умові симетричного

тетраедричного розміщення 4Ca^{2+} та 4Na^{2+} у восьми ділянках типу I. Відповідні потенціальні профілі показані на рис. 1.3.

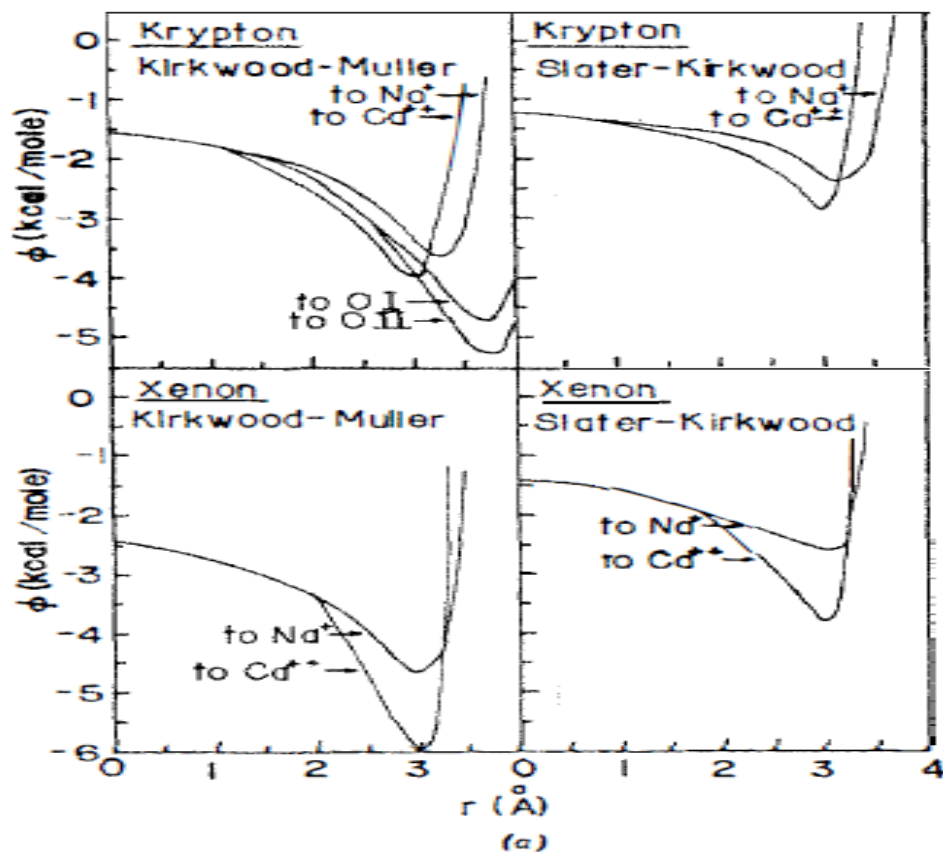


Рисунок 1.3. (а). Теоретичні профілі потенціалу вздовж діагоналі решітки до катіона ділянки I, розраховані відповідно за рівняннями (1.7) - (1.9) для інертних газів у цеоліті 5A [12-14]

Потенціали, розраховані за трьома часто використовуваними виразами, істотно відрізняються, хоча всі вони мають приблизно однакову порядок величини. Для Ar формула Лондона дає найкращий найкраще значення для ΔH_s , тоді як для Kr і Xe найкращою є формула Слатера-Кірквуда. Значення, оцінені за формулою Кірквуда-Мюллера, у всіх випадках завищені. Краще узгодження між теорією та експериментом щодо інертних газів у різних формах цеоліту X була отримана Бройером та ін. [6], які використовували вираз Кірквуда-Мюллера [7, 8]. Розрахункові величини, однак, досить чутливі до вибору рівноважного радіусу, який визначає силові константи відштовхування. Вибір радіусів чітко не визначений Бройером та ін. і, ймовірно, що вибрані значення були скоректовані в межах фізично обґрунтованих обмежень, для поліпшення їх придатності [8-14]. Існує також певна невизначеність у виборі фізичних значень параметрів для оцінки констант розсіювання, а також у розподілі заряду.

1.3.3. Величина відносного впливу електростатичної енергії та енергії розсіювання

Баррер [12, 26] запропонував таку процедуру як спосіб визначення електростатичного впливу до потенціалу адсорбції безпосередньо із експериментальних даних. Для неполярних молекул, таких як інертні гази або парафінові вуглеводні, лише неспецифічні умови $\phi_D + \phi_R + \phi_p$ можуть давати внески до потенціальної енергії, а для даного адсорбенту величина цих внесків в основному визначається поляризованістю адсорбату.

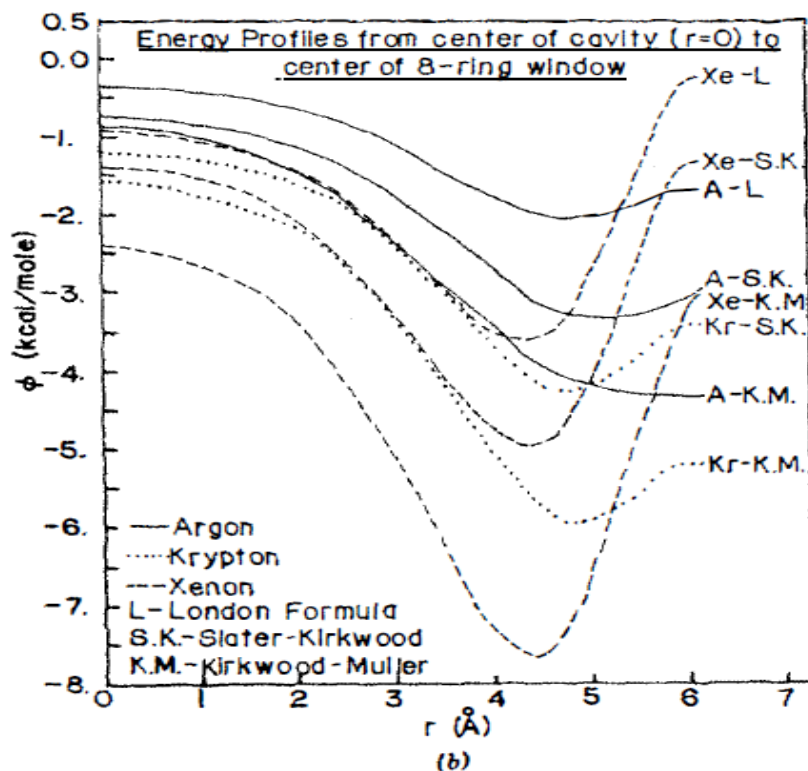


Рисунок 1.3(b). Теоретичні профілі потенціалу для центру решітки, розраховані відповідно до рівнянь. (1.7) - (1.9) для інертних газів у цеоліті 5A

Отже, якщо вихідні величини теплоти адсорбції для ряду різних неполярних молекул у даному адсорбенті визначаються поляризованістю, як показано на рис. 1.4, виходить характерна крива посилення, яка визначає загальний потенціал. Теплоти адсорбції полярних молекул лежать вище цієї кривої, а вплив дипольної та квадрупольної взаємодії може бути оцінений різницею значень на кривих [14]. Криві для трьох адсорбентів показані на рис. 1.4, а специфічні та неспецифічні впливи для декількох адсорбатів наведені в табл. 1.5 [14].

Подібний підхід був використаний Кісельовим [26] для цеоліту NaX, а також Ширмером та ін. [16] для CaA цеоліту. Безпосередні дані цих досліджень подані в табл. 1.6 і 1.7. Ефект безпосередніх взаємодій цілком очевидний, і для

малих полярних молекул, таких як H_2O , NH_3 і CH_3OH , електростатичний вплив не є визначальним. Навіть для N_2 , який має лише відносно малий квадрупольний момент і відсутній дипольний момент, відносний вплив в енергію адсорбції становить від 25 до 50%.

Теоретичний розрахунок теплоти сорбції для CO_2 у різних катіонних формах цеоліту X і був проведений Баррером і Гіббонсом [16].

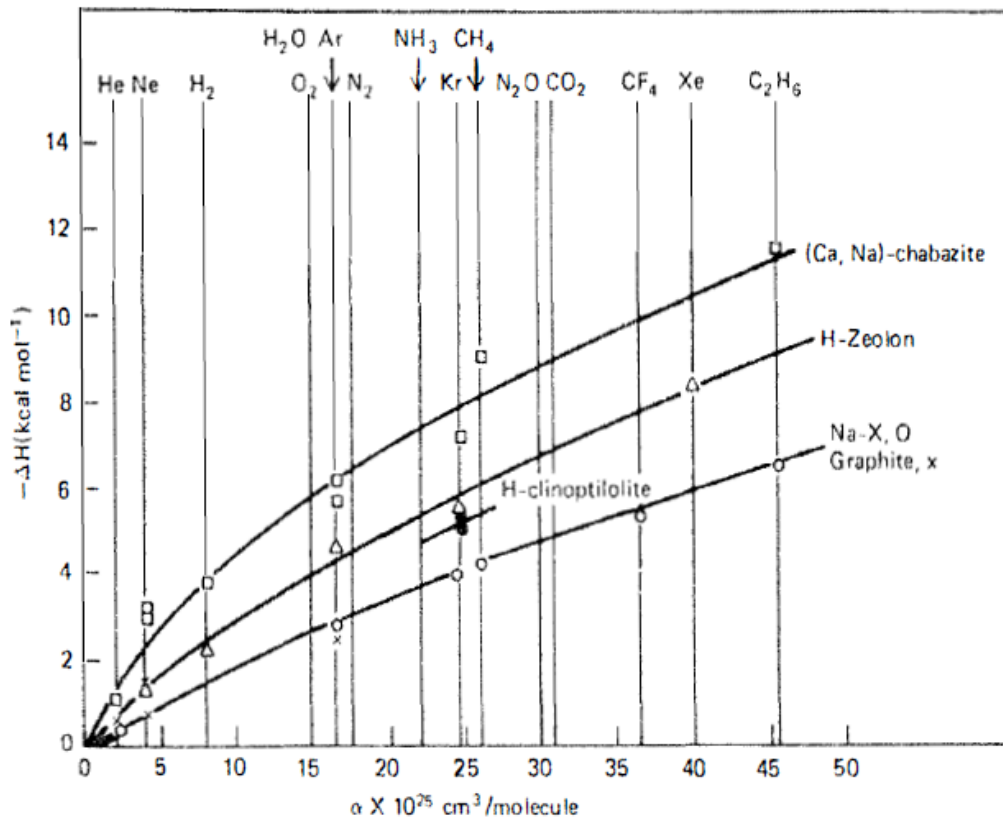


Рисунок 1.4. Характерні криві або ж гранична теплота сорбції та поляризованості для малих симетричних адсорбованих видів в: збагаченому Са хабазіті, Н-морденіті; +, На-морденіт, 13Х; , графітованому вуглеці [15]

Табл. 1.5. Розподіл компонент первинної теплоти адсорбції за типами взаємодій (дипольна+квадрупольна) та фізичних процесів (розсіювання + відштовхування + поляризація) [15]

| Вид цеоліту | Дегазація при °C Сорбат | | Сумарна величин | $-\Delta H(\text{кал/моль})$ | |
|-------------|----------------------------|------------------|--------------------|--------------------------------|---------------------------|
| | | | | Розсіювання+ | Дипольна+ |
| | | | | Відштовхування+ Поляризація | Квадрупольна взаємодії |
| Хабазит | 480 | N ₂ | 9,000 | 6,450 | 2,550 |
| | 450 | N ₂ O | 15,30 | 9,100 | 6,200 |
| | 480 | NH ₃ | 0 | 7,500 | 24,000 |
| | | | 31,50 0 | | |
| Н-морденіт | 350 | N ₂ | 6,200 | 4,500 | 1,700 |
| | | CO ₂ | 11,10 | 6,750 | 4,350 |
| | | | 0 | | |
| Na-морденіт | 350 | N ₂ | 7,000 | 4,500 ^a | 2,500 |
| | | CO ₂ | 15,70 | 6,750 ^a | 8,950 |
| | | | 0 | | |
| Na-фюзит | 350 | N ₂ | 6,500 | 3,100 | 3,400 |
| | | CO ₂ | 12,20 | 4,200 | 8,000 |
| | | NH ₃ | 0 | 3,750 | 14,250 |
| | | H ₂ O | 18,00 | 2,650 | ~31,350 |
| | | | 0 ~34,0 00 | | |
| Na-фюзит | 350 | CO ₂ | 8,200 | 4,850 ^b | 3,350 |

^a Вважається, що енергія розсіювання + енергія відштовхування + енергія поляризації для Na- та Н-морденітів обчислюється однаково.

^b Вважається, що енергія розсіювання + енергія відштовхування + енергія поляризації для Х і Y Na-форм обчислюється однаково.

Табл. 1.6. Теплоти адсорбції та питомі енергії взаємодії (ккал/моль) для сорбції різних видів у цеоліті NaX [13]

| Властивості, які визначають фізичну природу адсорбції | | | | |
|---|---|--------------|-------------------|----------------------------------|
| | Адсорбат | - ΔH | - ΔH_{sp} | $\frac{\Delta H_{sp}}{\Delta H}$ |
| <i>Молекули групи В</i> | | | | |
| π-зв'язки, | C ₂ H ₄ | 8,9 | 3,0 | 0,34 |
| квадрупольни | C ₆ H ₆ | 18,0 | 4,5 | 0,25 |
| й момент | N ₂ | 5,0 | 2,3 | 0,46 |
| | CO ₂ | 10,0 | 6,0 | 0,55 |
| Дипольний | (CH ₃) ₂ O | 21,0 | 7,6 | 0,36 |
| момент, | (C ₂ H ₅) ₂ O | 16,4 | 7,6 | 0,46 |
| здатність | CH ₃ NO ₂ | 19,9 | 10,0 | 0,50 |
| формувати | CH ₃ CN | 10,0 | 11,0 | 0,58 |
| водневі зв'язки тільки через кисень та атоми азоту | | | | |
| <i>Молекули групи D</i> | | | | |
| Дипольний | H ₂ O | 18,5 | (15,5) | (0,8) |
| момент, | CH ₃ OH | 18,4 | 13,2 | 0,72 |
| здатність | C ₂ H ₅ OH | 20,9 | 13,2 | 0,63 |
| утворювати | C ₃ H ₇ OH | 23,2 | 13,2 | 0,57 |
| водневі зв'язки | nC ₄ H ₉ OH | 26,0 | 13,2 | 0,51 |
| через атоми | NH ₃ | 16,0 | (12,5) | (0,8) |
| кисню або | CH ₃ NH ₂ | 18,0 | 11,5 | 0,64 |
| азоту, а також через атоми водню OH або NH | | | | |

Табл. 1.7. Обмеження теплоти адсорбції на 5А цеоліті, що показує польові складові (дипольні, квадрупольні) та силові (розсіювально-відштовхувальні+поляризація) впливи (ккал/моль) [16]

| Сорбат | μ (Дебай) | Поляризов | | | |
|---------------------------------|------------------|--|--|------------------------------|---------------|
| | | ність $\times 10^{25} \text{ см}^3 /$ molecule | $-(\varphi_D + \varphi_R + \varphi_P)$ | $-(\varphi_\mu + \varphi_Q)$ | $-\Delta H_Q$ |
| C ₂ H ₆ | 0 | 44.7 | 5,9 | 0 | 5,9 |
| C ₃ H ₈ | 0 | 62.9 | 8,4 | 0 | 8,4 |
| nC ₄ H ₁₀ | 0 | 81.2 | 10,4 | 0 | 10,4 |
| C ₃ H ₆ | 0,35 | 60.8 | 8,1 | 3,2 | 11,3 |
| CH ₃ | 1,33 | 53.1 | 7,1 | 11,9 | 19,0 |
| NH ₂ | 1,39 | 89.7 | 12,0 | 14,0 | 26,0 |
| nC ₃ H ₇ | 1,46 | 22,2 | 3,0 | 22,0 | 25,0 |
| NH ₂ | 1,68 | 32.3 | 4,3 | 15,2 | 19,5 |
| NH ₃ | | | | | |
| CH ₃ OH | | | | | |

Табл. 1.8. Компоненти φ_D , φ_P , φ_Q , and φ_0 (ккал/моль) для сорбції CO₂ у Цеоліті X [17]

| Компонента взаємодії CO ₂ | з Катіонна форма цеоліту | | | | |
|--|--------------------------|------|------|------|------|
| | Li | Na | K | Rb | Cs |
| φ_D^* (кисень) | -3,8 | -3,1 | -1,7 | -1,1 | -1,1 |
| φ_D^* (катіони) | -0,1 | -0,2 | -0,8 | -1,1 | -2,2 |
| φ_P^+ | -2,3 | -1,2 | -0,5 | -0,2 | -0,0 |
| φ_{FQ}^* | -7,4 | -5,1 | -4,2 | -3,5 | -2,3 |
| φ_0 | +0,4 | +0,3 | +0,3 | +0,3 | +0,3 |
| $\Sigma \varphi$ | -13,2 | -9,3 | -6,9 | -5,6 | -5,3 |

Впливи розсіювання, відштовхування та поляризації оцінювалися аналогічно, як для інертних газів, і вплив квадрупольної взаємодії оцінювався за рівняннями (1.11) і (1.12). Було розглянуто три ситуації: молекула CO₂, що вільно обертається; молекула CO₂, орієнтована вздовж осі (1, 1, 1) від центру 12-кільця до катіонного вузла II типу у центрі 6-кільця та молекула з віссю перпендикулярною до цього напрямку. Результати цих розрахунків, наведені у таблицях 2.8 та 2.9, свідчать, що молекула CO має тенденцію орієнтуватися

вздовж осі (1, 1, 1). Зміна φ_D , φ_p та φ_Q у різних катіонних формах чітко свідчить про збільшення електростатичного внеску ($\varphi_p + \varphi_Q$) зі зменшенням розміру катіона.

Відповідні розрахунки були проведені для NH_3 у цеоліті X за Баррером та Гіббонсом [17].

Табл. 1.9. Порівняння розрахункових та експериментальних значень ΔU_0 (ккал/моль) [17]

| значення енергій | катіонна форма цеоліту | | | | |
|--|------------------------|------|------|------|-----|
| | li | na | k | rb | cs |
| - δe | 12,3 | 10,8 | 10,5 | 10,1 | 8,8 |
| - σf eq. (2,9) | 13,2 | 9,3 | 6,9 | 5,6 | 5,3 |
| - σf eq. (2,7) | 11,7 | 7,9 | 5,5 | 4,6 | 3,7 |
| - σf eq. (2,9) | 1,7 | 2,3 | 0,6 | 2,1 | 3,9 |
| - σf eq. (2,9) | | | | | |
| кінетичний радіус, CO_2 обертання | 29,5 | 15,0 | 13,3 | 10,4 | 9,2 |

1.4. Адсорбція на низькому рівні: закон Генрі

При фізичній адсорбції немає змін у молекулярному стані речовини (тобто її асоціація чи дисоціація відсутня). Звідси випливає, що при адсорбції на рівномірній поверхні при досить низьких концентраціях, таких, що всі молекули ізольовані від їх найближчих сусідів, рівноважне співвідношення між концентраціями рідкої фази та адсорбованими фазними концентраціями буде лінійною. Ця лінійна залежність зазвичай називається законом Генрі за аналогією з граничною поведінкою рішень газів у рідинах та константи пропорційності, яка є просто константою адсорбційної рівноваги і називається константою Генрі. Константу Генрі можна виразити як через тиск, так і через концентрацію [19]:

$$q = Kc \text{ або } q = K'p \quad (1.17)$$

де q та c виражаються як молекули чи молі на одиницю об'єму в адсорбованій і рідкій фазах. З ідеального закону газу випливає, що $K = K'RT$. З іншого боку, в плані концентрації на поверхні (n_s):

$$n_s = \frac{K}{S} c = \frac{K'}{S} P, \quad (1.18)$$

де S - питома площа поверхні на одиницю об'єму адсорбенту.

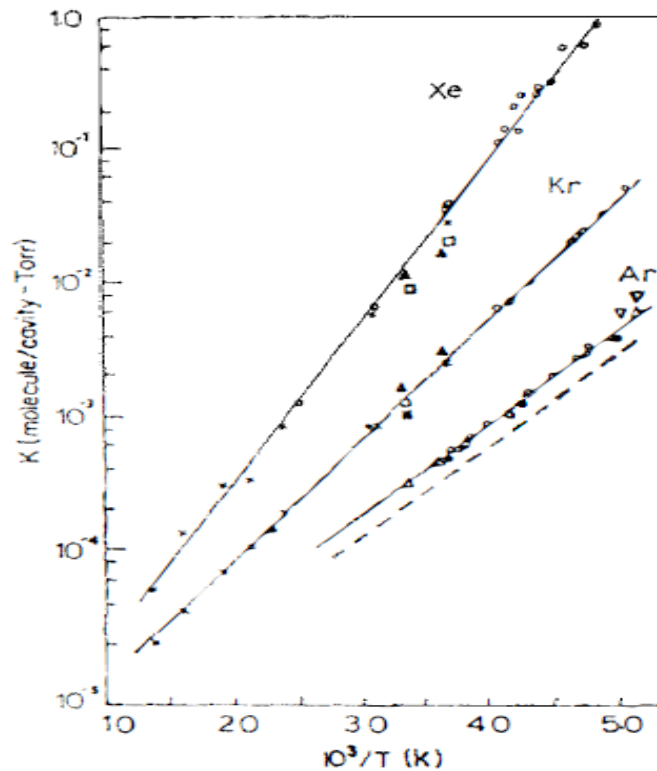


Рисунок 1.5. Криві Вант Гоффа, які демонструють показує температурну залежність експериментальних констант Генрі для Ar, Kr та Xe в кристалах цеоліту Linde 5A. Пунктирна лінія представляє дані для Ar у Linde 4A [14].

Температурна залежність постійної Генрі визначається рівнянням Вант-Хоффа [14]:

$$\frac{d \ln K'}{dT} = \frac{\Delta H_0}{RT^2}, \quad \frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta U_0}{RT^2} \quad (1.19)$$

де ΔH_0 і ΔU_0 відповідно представляють різниці ентальпії та внутрішньої енергії для адсорбованого та газоподібного станів. Нехтуючи різницею у молярній теплоємності між фазами речовини у рівнянні (1.19), вони можуть бути інтегровані, в результаті чого отримується:

$$K' = K'_0 e^{-\frac{\Delta H_0}{RT}}, \quad K = K_0 e^{-\frac{\Delta U_0}{RT}}. \quad (1.20)$$

Відповідно до рівняння (1.20), графіки залежності $\ln K$ від $1/T$ часто виявляються по суті лінійними у широкому діапазоні температур (рис. 1.5).

1.4.1. Теоретичний розрахунок констант Генрі

У статистичній термодинамічній формулюванні константа Генрі визначається співвідношенням функцій розбиття на одиницю об'єму для адсорбованої і газової фаз з відповідною корекцією різниці потенційної енергії (f'_s / f'_g). Оскільки для інертного газу внутрішні ступені свободи відсутні, тому, в класичному наближенні, це відношення статистичних величин еквівалентне інтегралу конфігурації [2] і має простий результат:

$$K = \frac{f'_s}{f'_g} = Z = \int_0 \exp\left[-\frac{\varphi(r)}{kT}\right] dr \approx K_0 e^{-\frac{\bar{\varphi}}{kT}}. \quad (1.21)$$

Таким чином, можна отримати закон Генрі теоретично шляхом оцінки інтегралу конфігурації за умови, що потенціал $\bar{\varphi}$ відомий як функція положення по всьому адсорбційному простору.

Результати таких розрахунків для інертних газів в цеолітах 5А наведені на рис. 1.6 [14]. Для аргону потенціали, розраховані по виразом Лондона, дають найкраще наближення до експериментальних даних, тоді як для ксенону вираз Слейтера-Кірквуда найкраще узгодження результатів [6]. Експериментальні значення для криптону лежать між передбаченнями виразів Слейтера-Кірквуда і Кірквуда-Мюллера [7,8].

Враховуючи обмежену точність наявних методів розрахунку дисперсійних констант, Майерс і колеги [12] розраховували електричне поле і енергію поляризації звичайним чином, але апроксимували суму для потенціалу розсіювання - відштовхування інтегралом, в якому середня постійна дисперсії зберігалася як невідомий параметр. Далі оцінювався інтеграл конфігурації, і значення для середнього коефіцієнта дисперсії знаходилося шляхом зіставлення теоретичних і експериментальних констант Генрі [14]. Таким чином, оцінка здійснюється одним регульованим параметром для кожного з газів і узгоджується в широкому діапазоні температур.

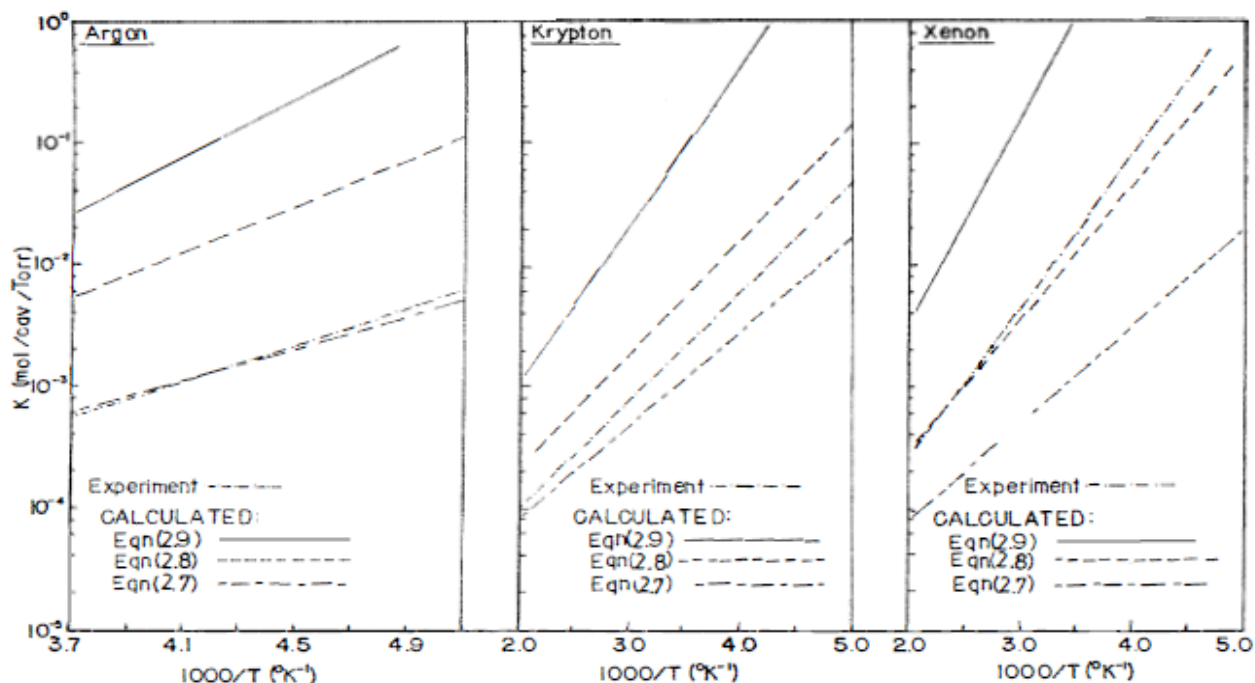


Рисунок 1.6. Порівняння експериментальних та теоретичних констант Генрі для Ar, Kr і Хе в цеоліті 5А, розраховане з потенціальних профілів, отриманих з рівнянь Лондона, Слейтера-Кірквуда та Кірквуда-Мюллера (Рівн. (1.7)-(1.9)) [14].

Табл. 1.10. Порівняння коефіцієнтів теоретичної дисперсії для інертних газів в 5А Цеолітах з значеннями, отриманими від даних констант Генрі [19]

| $A_{S-K} \times 10^{43}$ | $A_{K-M} \times 10^{43}$ | $\bar{A} \times 10^{43}$ | |
|--------------------------|--------------------------|--------------------------|------|
| Ar | 8.9 | 11.9 | 9.8 |
| Kr | 12.0 | 17.5 | 13.7 |
| Xe | 16.9 | 27.6 | 22.0 |

Одиниці виміряні в $\text{см}^6 \text{ моль}^{-1}$. Середні значення розраховуються з припущенням $480^{-1/4}$, 4Ca^{2+} , та 4Na^+ на пору.

Таким чином, з одним регульованим параметром для кожного газу, було отримано хороші результати в широкому діапазоні температур. У таблиці 2.10 середні коефіцієнти дисперсії для Ar, Kr, і Хе в 5А цеоліті, розрахована з значень, наданих Меєрсом [20], порівнюються з теоретичними значеннями з формул Слейтера-Кірквуда та Кірквуда-Мюллера. Значення, необхідні для відповідності константам Генрі, виглядають достовірними, будучи близькими до середнього значення оцінювання з цих двох теоретичних виразів [14].

Для цеолітних адсорбентів, що складаються з окремих клітин, з'єднаних через відносно невеликі пори, формула (1.21) припускає дуже просту форму, якщо адсорбовані види можна розглядати як збереження повного переносу, обертальну та внутрішню свободу в межах вільного обсягу пори [20]:

$$\frac{-\Delta H_0}{N} = -\bar{\phi} + kT$$

$$K = K'kT = \frac{v}{e} e^{-\Phi/kT} = \frac{v}{e^2} e^{-\Delta H_0/RT}, \quad K'_0 = \frac{v}{e^2 kT}. \quad (1.22)$$

Вільний обсяг пори (v) менший, ніж фактичний об'єм, оскільки в результаті його кінцевих розмірів молекула сорбату не може наблизитись до пористої стінки. В якості грубого наближення ми можемо взяти вільний об'єм як об'єм сфери, що дорівнює різниці реального діаметру та Ван-дер-Ваальсового діаметру молекули сорбату. Значення v та K'_0 , оцінювані на цій основі, підсумовуються в табл.1.11 [12]. Для неполярних видів приблизні значення K'_0 цілком близькі до експериментальних значень. Для N_2 та CO_2 експериментальні значення значно менші, ніж прогнозовані таким чином значення. Це слід очікувати через значний ступінь локалізації і, можливо, певної втрати свободи обертання, що може виникати з цими адсорбатами в результаті електростатичної (квадрупольної) енергії взаємодії. Дана модель володіє високим ступенем надійності і дає достовірну оцінку значень [14].

За цим принципом можна продовжити теоретичний розрахунок констант Генрі до більш складних молекул, де треба враховувати інші внески у потенціал, такі як дипольні та квадрупольні енергії, а також обмежену свободу переміщення. Такі розрахунки були здійснені Сарджендом та Уїтфордом [21] для системи CO_2 -5A [20].

Табл. 1.11. Значення K'_0 та $-\Delta H_0$ вказують на температурну залежність констант Генрі для легких газів у цеоліті 5A згідно з рівнянням (1.20) [20]

| Сорбат | Теоретичні значення ^b | | Експериментальні значення | | |
|---------------------------------|----------------------------------|--------------------|---------------------------|---------------|--|
| | $v(\text{\AA})^3$ | $K'_0 \times 10^8$ | $K'_0 \times 10^8$ | $-\Delta H_0$ | |
| CH ₄ | 285 | 137 | 190 | 4.54 | |
| C ₂ H ₆ | 239 | 95 | 77 | 6.6 | |
| C ₃ H ₈ | 206 | 80 | 124 | 8.1 | |
| nC ₄ H ₁₀ | 167 | 53 | 86 | 10.2 | |
| C ₂ H ₄ | 256 | 113 | 109 | 8.0 | |
| C ₃ H ₆ | 213 | 77 | 79 | 10.0 | |
| CF ₄ | 157 | 51 | 38 | 5.9 | |
| N ₂ | 293 | 138 | 10 | 5.7 | |
| CO ₂ | 284 | 123 | 9.2 | 10.8 | |

^a K'_0 а в молекулі / клітці мм.рт.ст і $-\Delta H_0$ в ккал / моль.

^b Теоретичні значення v та K'_0 розраховано з рівняння (1.22) для порівняння.

1.4.2. Обмежене обертання

Для багатоатомної молекули обмеження свободи обертання в адсорбованій фазі можна враховувати таким чином, щоб замість рівняння (1.21) отримано [20]:

$$K_{\text{poly}} = \frac{z(f_{\text{rot}})_s}{(f_{\text{rot}})_g}, \quad (1.23)$$

де $(f_{\text{rot}})_s / (f_{\text{rot}})_g$ представляє співвідношення функцій обертального розподілу для адсорбованих та газоподібних молекул. Конфігураційний інтеграл визначається в основному розміром і здатністю до поляризації молекули. Для адсорбції пар одноатомних та багатоатомних молекул аналогічного розміру та поляризації на одному і тому ж адсорбенті інтеграли конфігурації повинні бути по суті однаковими, так що [20, 21]:

$$K_{\text{poly}} \approx (K_0 e^{-\bar{\Phi}/kT})_{\text{mono}} \frac{(f_{\text{rot}})_s}{(f_{\text{rot}})_g} \quad (1.24)$$

Або ж:

$$\frac{(K_0)_{\text{poly}}}{(K_0)_{\text{mono}}} \approx \frac{(f_{\text{rot}})_s}{(f_{\text{rot}})_g}, \quad (1.25)$$

де K_0 являє собою доекспоненційний фактор у співвідношенні вант Хоффа до констант Генрі ($K = K_0 e^{-\Delta H/RT}$).

Дані для пар молекул $\text{O}_2\text{-Ar}$ та $\text{CH}_4\text{-Kr}$, що приблизно відповідають вимогам однакового розміру та поляризаційної здатності, порівнюються в табл. 1.12. Експериментальні константи Генрі для сорбції на обох 5А-зеолітах та молекулярному ситому вуглецю дозволяють припустити, що кисень зберігає практично повну свободу обертання в фазі адсорбції [23].

Значення $(f_{\text{rot}})_s / (f_{\text{rot}})_g$ для метану дещо менші, ніж одиниця, що може припускати деяке обмеження свободи обертання. Однак, оскільки $(f_s)_{\text{rot}} / (f_{\text{rot}})_g$ значно більші, ніж $1/(f_{\text{rot}})_s$, гранична величина для необертової молекули сорбату, що дозволяє зробити висновок, що зберігається значна свобода обертання. З огляду на приблизний характер цього аргументу, такий висновок, очевидно, є передчасними. Такий же висновок був досягнутий за допомогою незалежних спектроскопічних доказів, що також свідчить про те, що адсорбований метан зберігає частину, а не увесь діапазон обертової свободи [24].

Таблиця 1.12. Порівняння радіусів, поляризаційної здатності та констант Генрі для O₂-Ar та CH₄-Kr в цеоліті 5A

| | Kr | CH ₄ | Ar | O ₂ |
|--|--|---|---|---|
| σ (Å) | 3.6 | 3.8 | 3.44 | 3.5 |
| $10^{25} \times \alpha$ (см ³ /молекул) | 25 | 26 | 16.3 | 16.0 |
| 5A ^a | $\begin{cases} \Delta H_0 (\text{ккал} / \text{моль}) & 4.25 \\ K'_0 (\text{молекул} / \text{пор}) \times 10^6 & 1.26 \end{cases}$ | $\begin{cases} 5.1 \\ 0.6 \end{cases}$ | $\begin{cases} 3.28 \\ 1.2 \end{cases}$ | $\begin{cases} 3.3 \\ 1.48 \end{cases}$ |
| Цеоліт | | | | |
| | 0.5 | | 1.2 | |
| MSC ⁽²²⁾ | $\begin{cases} -\Delta H_0 (\text{ккал} / \text{моль}) & 5.6 \\ K_0 (\text{см}^3 / \text{г при } 298 \text{ K}) \times 10^3 & 3.8 \end{cases}$ | $\begin{cases} 5.7 \\ 4.47 \end{cases}$ | $\begin{cases} - \\ - \end{cases}$ | $\begin{cases} - \\ - \end{cases}$ |
| | 0.73 | | - | - |

^aДані університету Нью-Брансвік [23, 24]

Обмеження обертальної свободи у адсорбованій фазі є набагато важливішим для полярних та квадрупольних молекул, таких як CO₂ та NH₃, в полярних адсорбентах, але, на жаль, такі системи не піддаються простому аналізу.

1.5. Одно- та багат шарова адсорбція

Брунауер та співавт. [25] розділили ізотерми для фізичної адсорбції на п'ять класів, як це показано на рис. 1.7. Ізотерми справжніх мікропористих адсорбентів, у яких розмір пор не набагато більший, ніж молекулярний діаметр молекули адсорбату, зазвичай мають тип I.

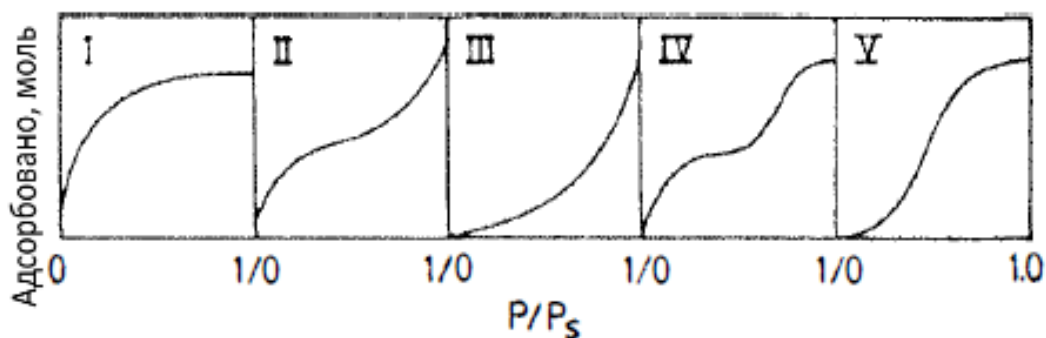


Рисунок 1.7 Брунауерська класифікація ізотерм

Це спричинено тим, що з такими адсорбентами існує певна межа насичення, що відповідає повному заповненню мікропор. Іноді, якщо ефекти міжмолекулярного притягання великі, спостерігається ізотерма типу V, як, наприклад, у адсорбції парів фосфору на NaX [23, 24]. Ізотерма типу IV наводить на думку про утворення двох поверхневих шарів на плоскій поверхні або на стіні пори, яка набагато ширша, ніж молекулярний діаметр сорбату. Ізотерми типів II та III, як правило, спостерігаються тільки в адсорбенті, в яких існує широкий діапазон розмірів пор. У таких системах спостерігається безперервна прогресія із збільшенням навантаження від моношарової до багатошарової адсорбції, а потім до конденсації капілярів. Збільшення потужності при високих тисках відбувається через капілярну конденсацію, що виникає в порах збільшеного діаметра, оскільки піднімається тиск.

1.5.1. Ізотерма Ленгмюра

Найпростіша теоретична модель моношарової адсорбції описана Ленгмюром [26]. Спочатку модель Ленгмюра була розроблена для представлення хемосорбції на безлічі різних локалізованих сторін адсорбції. Нижче наведено просту кінетичну деривацію та більш складну термодинамічну деривацію, яка має перевагу, чіткого виявлення точного значення константи рівноваги Ленгмюра.

Основні припущення, на яких базується модель, є [26]:

1. Молекули адсорбуються в фіксованій кількості чітко визначених локалізованих ділянок.
2. Кожна сторона може вмістити одну молекулу адсорбату.
3. Всі сторони енергетично еквівалентні.
4. Між молекулами, адсорбованими на сусідніх ділянках, взаємодії немає.

З огляду на обмін молекулами між адсорбованими та газоподібними фазами

Швидкість адсорбції :

$$k_a p(1 - \theta) \quad (1.26)$$

Швидкість десорбції:

$$k_d \theta,$$

де q_s це загальна кількість ділянок на одиницю ваги або обсягу адсорбенту і $\theta = q / q_s$ це дробове покриття.

При рівновазі темпи адсорбції та десорбції рівні:

$$\frac{\theta}{1-\theta} = \frac{k_a}{k_d} \rho = b\rho \quad (1.27)$$

де $b = k_a / k_d$ є константою адсорбційної рівноваги. Рівняння (1.27) може бути перетворене до загальної наведеної форми:

$$\theta = \frac{q}{q_s} = \frac{bp}{1+bp} \quad (1.28)$$

Цей вираз показує правильну асимптотичну поведінку для адсорбції моношару, оскільки з насичення $p \rightarrow \infty$, $q \rightarrow q_s$, та $\theta \rightarrow 1.0$ тоді як при низьких концентраціях сорбату наближається до закону Генрі [26]:

$$\lim_{p \rightarrow 0} \left(\frac{q}{p} \right) = bp_s = K' \quad (1.29)$$

Величина q_s повинна представляти фіксовану кількість поверхневих ділянок, і тому вона бути температурно-незалежною константою, тоді як температурно-залежна константа рівноваги повинна відповідати рівнянню Вант Хоффа [14, 26]:

$$b = b_0 \exp\left(\frac{-\Delta H_0}{RT}\right). \quad (1.30)$$

Оскільки адсорбція є екзотермічною (ΔH від'ємне) b повинен знижуватися з підвищенням температури.

Припущення про ідентичні сторони без взаємодії між адсорбованими молекулами означають, що теплота адсорбції не залежить від покриття. Це впливає з диференціального рівняння (1.27) що ізотермічна теплота сорбції ($-\Delta H_s$) така ж, як і гранична теплота сорбції ($-\Delta H_0$):

$$\frac{\partial \ln p}{\partial T} = \frac{\Delta H_s}{RT^2} = \frac{d \ln b}{dT} = \frac{d \ln K}{dT} = \frac{\Delta H_0}{RT^2}. \quad (1.31)$$

Зазвичай запропоновані процедури для тестування придатності моделі Ленгмюра до експериментальних даних включають в себе також залежність p/q від p чи $1/q$ від $1/p$.

Рівняння (1.28) можна привести до вигляду:

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{bq_s} + \frac{p}{q_s} \quad \text{або} \quad \frac{1}{q} = \frac{1}{q_s} + \frac{1}{bq_s} \frac{1}{p} \quad (1.32)$$

Тому очевидно, що параметри моделі b та q_s можуть бути легко отримані з нахилів і перехоплення таких ділянок. Графік p/q та p дещо нечутливі до малих відхилень від моделі, оскільки тиск відбувається в обох змінних. Оскільки модель Ленгмюра має правильну якісну форму для представлення ізотерми типу I, то вона досить добре підходить багатьом експериментальним ізотермам, які часто можна отримати за досить широких діапазонів концентрації шляхом відповідного вибору констант b та q_s .

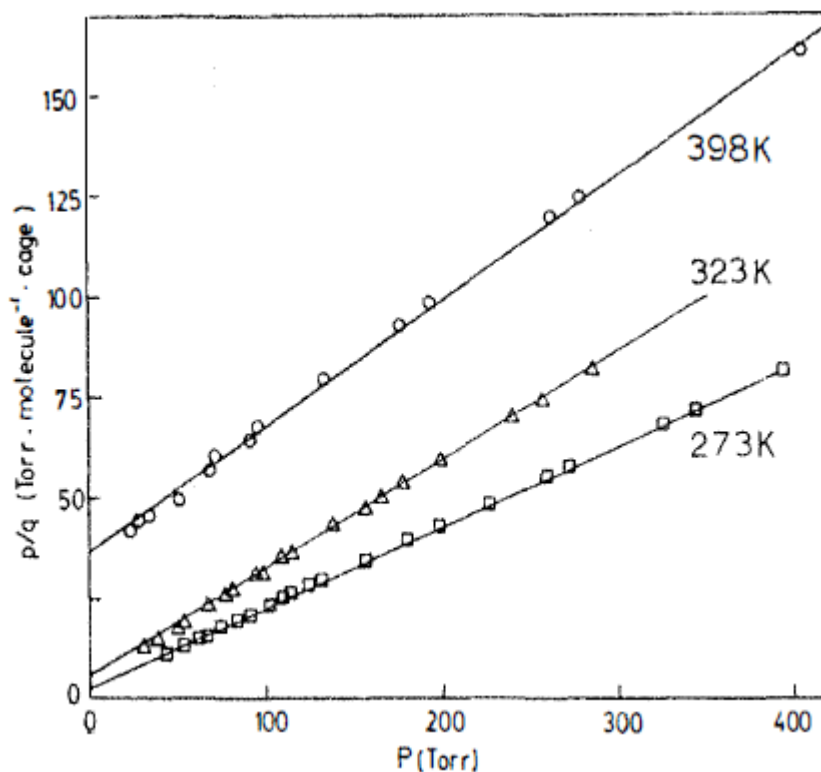


Рисунок 1.8 Ленгмюровські ділянки, що демонструють відповідність рівнянню Ленгмюра (1.32) рівноважних даних пропану в цеоліті 5А [27]

Проте, якщо експериментальні дані не поширюватимуться на весь діапазон концентрацій згідно закону Генріха до майже насиченого, то константи, отримані шляхом збігу експериментальних даних з моделлю, можуть не мати фізичного значення. Це проілюстровано на рис. 1.8 та табл. 1.13 [27], що демонструють експериментальні дані рівноваги для пропану в цеоліті 5А, проаналізовані відповідно до рівняння (1.32). На всіх температурах ділянки свідчать про невелике відхилення від лінійності, що свідчить про те, що модель Ленгмюра є правильним поданням. При найвищій температурі компоненти поширюються

лише приблизно до 50% від потужності насичення і константа Генрі, отримана з виразу Ленгмюра, досить близька до значення, визначеного з більш детального аналізу даних низької концентрації [26].

Таблиця 1.13. Адсорбція пропану на цеоліті 5A. Порівняння параметрів, розрахованих за моделлю Ленгмюра із значеннями, отриманими з допомогою більш детального аналізу [27]

| Температура (К) | константа Генрі K або bq_s (молекул/пору) | | Насиченість ліміту q_s , (молекул/пору) | |
|--------------------|--|--------------------|--|-----------------|
| | Детальний аналіз | Графік Ленгмюра | Детальний аналіз | Графік Ленгмюра |
| 273 | 3.96 | 0.4 | ~5 | 5.0 |
| 323 | 0.321 | 0.182 | ~5 | 3.7 |
| 398 | 0.033 | 0.028 | ~5 | 3.18 |

Очевидна цінність q_s значно нижча за справжній межі насичення. І навпаки, при найнижчій температурі експериментальні дані охоплюють лише область високої концентрації. Значення q_s з лінеаризованого графіка є принципово правильним, тоді як константа Генрі достатньо хибні.

Модель адсорбції на множині різних локалізованих ділянок взагалі більш доречна для хемосорбції, ніж для фізичної адсорбції, оскільки в багатьох випадках фізично адсорбований шар дуже рухливий і більше нагадує двовимірний газ. Однак, рівняння Ленгмюра може бути отримано з ізотерми адсорбції Гіббса як наближення для рухомих фізичних адсорбції при порівняно низькому покритті [27], і тому застосування цієї моделі до фізичної адсорбції є теоретично обґрунтованим. Крім того, існує цілий ряд цеолітних систем, таких як аргон у содаліті, для яких основні припущення локалізованої моделі точно виконуються, оскільки кожна клітина може вмістити лише одну молекулу сорбату.

1.5.2. Ізотерма BET

Оскільки практично всі практично важливі адсорбенти є пористими твердими речовинами, ключовим параметром, який необхідний для характеристики адсорбенту, є питома поверхня. Конкретні ділянки мікропористих твердих речовин дуже великі, а значення кількох сотень квадратних метрів/г не є

рідкістю. Точне вимірювання площі поверхні мікропористих твердих тіл представляє значну проблему при ранніх дослідженнях адсорбції та каталізу.

Очевидно, що, якщо фізична адсорбційна здатність обмежувалася моношаром з наближеним запасом, визначення межі насичення від експериментальної ізотерми з молекулою відомих розмірів забезпечить простий і прямолінійний метод оцінки конкретної області. Основна складність полягає в тому, що при хемоадсорбції, ділянки, як правило, широко розставлені, так що межа насичення не має очевидного зв'язку з конкретною поверхнею, тоді як фізична адсорбція зазвичай включає багатошарову адсорбцію. Формування другого та наступного молекулярних шарів починається при тиску, що значно нижчий, ніж необхідний для завершення моно шару, тому не відразу очевидно, як отримати мікрошарову ємність з експериментальної ізотерми. Цю проблему вперше вирішили Брунауер, Еммет, Теллер [28] (BET) які розробили просту модель ізотерми для врахування багатошарової адсорбції та використали цю модель для витягання моношарової ємності, а отже, і конкретної зони проходження. Ряд уточнень моделі BET та експериментальний метод розроблено нещодавно, проте основний метод BET залишається найбільш широко використовуваним методом для вимірювання питомої площі поверхні [28].

Точне теоретичне обґрунтування багатошарової адсорбції представляє величезні проблеми, тому що необхідно враховувати не тільки взаємодію між молекулами сорбату та поверхнею адсорбенту, але й внутрішню сорбат-взаємодію, яка часто є досить приблизною величиною. Модель BET базується на ряді досить серйозних ідеалізацій, які в кращому випадку можуть бути не більш ніж першим наближенням. Вважається, що кожна молекула в першому адсорбованому шарі забезпечує одне "місце" для другого та наступного шарів. Молекули другого та наступного шарів, які контактують з іншими молекулами сорбату, а не з поверхнею адсорбенту, як правило, ведуть себе як насичена рідина, тоді як константа рівноваги для першого шару молекул, що контактує з поверхнею адсорбенту, відрізняється.

Вираз для ізотерми BET може бути отриманий з цих припущень або шляхом розширення простого кінетичного аргументу, викладеного вище для випадку моношару, або більш точним термодинамічним аргументом.

Результуючим рівнянням для ізотерми рівноваги BET є [28]:

$$\frac{q}{q_m} = \frac{b(p/p_s)}{(1 - p/p_s)(1 - p/p_s + bp/p_s)}, \quad (1.33)$$

у якій p_s являє собою тиск насиченої пари насиченого сорбату рідини при відповідній температурі. Це вираз, який має загальну форму ізотерми типу II в класифікації Брюнауера, та було встановлено, що він добре відображає

експериментальну ізотерму фізичної адсорбції за умови, що діапазон тиску обмежений знизу до $0.05 < p / p_s < 0.35$ [28].

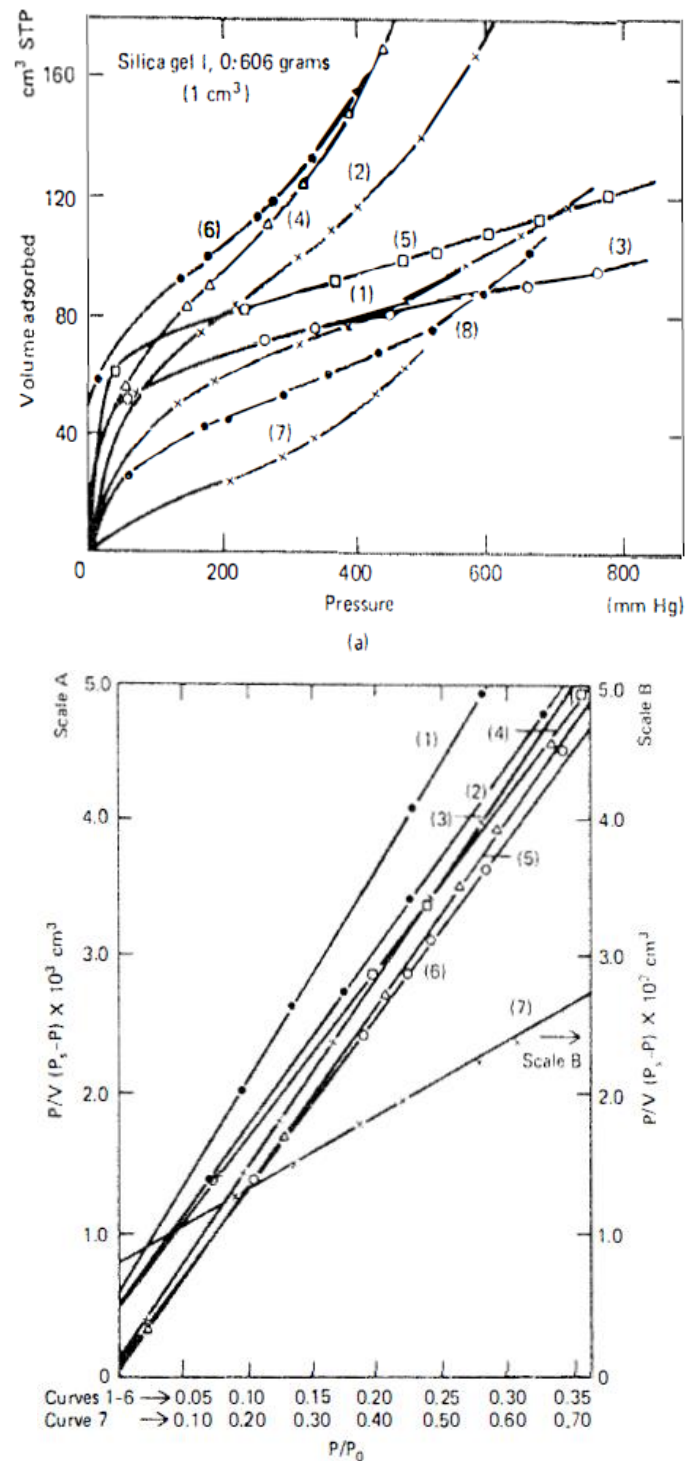


Рисунок 1.9. (а) Експериментальні ізотерми та (b) БЕТ-ділянки для адсорбції на силікагелі (1) CO_2 при -78°C ; (2) Ar при -183°C ; (3) N_2 при -183°C ; (4) O_2 при -183°C ; (5) CO при -183°C ; (6) N_2 при -195.8°C ; (7) C_4H_{10} при 0°C ; та (8) SO_2 при 0°C . [28]

Знаючи тиск пари насичення та поглинання рівноваги при декількох тисках у встановленому діапазоні, p_s , концентрація сорбату, яка відповідає замкнутому моношару, може бути легко виявлено з графіка $p/q (p_s - p)$ від p / p_s . Використовувані експериментальні дані ізотерм фізичної адсорбції показані на рис.1.9 [28]. Щоб перенести поверхню моношару в певну область, потрібно знати розмір молекули сорбату. Як правило, припускається, що закрите середовище сферичних молекул діаметра рівне діаметру Ван дер-Ваальса [28, 29].

Очевидно, що для того, щоб проводити вимірювання в межах необхідного діапазону відносного тиску при зручному вимірюваному абсолютному тиску, повинна бути ретельно підібрана температура вимірювань. Вимірювання виконувались з використанням азоту, як адсорбату, при температурі рідини N_2 , але можуть використовуватися й інші малі молекули також [28, 30-35]. Деякі ознаки точності моделі BET як методу визначення площі поверхні можуть бути отримані шляхом порівняння даних, отриманих з різними сорбатами на одному і тому ж пористому матеріалі. Деякі репрезентативні дані, отримані з каталізатором синтезу мікропористих NH_3 , наведені у табл. 1.14 [28, 36]. Ці дані дозволяють припустити, що абсолютна площа може бути визначена приблизно в межах $\pm 20-25\%$ з використанням цього методу. Відносні площі можуть бути визначені з дещо більшою точністю, порівнюючи поглинання різними адсорбентами в тому ж відносному діапазоні тиску [28-37].

Список джерел до розділу 1

1. E. A. Moelwyn-Hughes, *Physical Chemistry*, 2nd ed. Pergamon Press, Oxford. 1961.
2. J. O. Hirschfelder, C. F. Curtis, and R. B. Bird, *Molecular Theory of Gases and Liquids*. Wiley, New York, 1954.
3. D. M. Young and A. D. Crowell, *Physical Adsorption of Gases*. Butterworths, London. 1962.
4. F. London, *Zeit. Phys.* 6.1, 245 (1930).
5. F. London, *Zeit. Phys. Chem.* 811, 222 (1940),
6. J.C. Slater and J. G. Kirkwood, *Phys. Rev.* 37,682 (1931).
7. J. G. Kirkwood, *Phys. Zeit.* 33, 57 (1932).
8. A. Muller, *Proc. Roy. Soc.* **A154**, 624 (1936).
9. S. Ross and J. P. Olivier, *On Physical Adsorption*. Wiley, New York, 1964, p. 267.
10. R. M. Barrer, *Zeolites and Clay Minerals*. Academic Press, London, 1978.
11. I. I. P. Broier, A. V. Kiselev, E. A. Lesnik, and A. A. Lopatkin, *Russ. J. Phys. Chem.* 42(10), 135 (1968).
12. P. Broier, A. V. Kiselev, A. A. Lopatkin, and S. Shpigil, *Doklady Akad. Nauk. SSSR* **161(4)**, 853-856 (1965).
13. A. V. Kiselev, *Adv. Chem.* 102, 37 (1971).
14. R. I. Derrah and D. M. Ruthven, *Can. J. Chem.* 53, 996 (1975).
15. R. M. Barrer, *J. Coll. Interface Sci.* 21, 415 (1966).
16. W. Schirmer, G. Meinert, and A. V. Grossmann, *Monatsberichte* 11, 886 (1969).

16. R. M. Barrer and R. M. Gibbons, *Trans. Faraday Soc.* **59**, 2569 (1963) and 61, 948 (1965).
17. A. V. Kiselev and P. Q. Du, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. fl* 74, 367 (1978); 77, 1 (1981); and 77, 17 (1981).
18. J. L. Soto, P. W. Fisher, A. J. Glessner, and A. L. Myers, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. I* 11, 157 (1981).
19. D. M. Ruthven, K. F. Loughlin, and R. I. Derrah, *Adv. Chem.* 121, 330 (1973).
20. R. W. Sargent and C. J. Whitford, *Adv. Chem.* 102, 144 (1971).
21. K. Chihara, M. Suzuki, and K. Kawazoe, *AIChE JI* 24, 237 (1978).
22. E. Cohen de Lara, *Proceedings of the Fifth International Conference on Zeolites, Naples, June 1980*. Heyden, London, 1980, p. 414.
23. E. Cohen de Lara and Y. DeLaval, *J. Phys. Chem.* 78, 2180 (1974).
24. S. Brunauer, L. S. Deming, W. E. Deming, and E. J. Teller, *J. Am. Chem. Soc.* 62, 1723 (1940).
25. I. Langmuir, *J. Chem. Soc.* 40, 1361 (1918).
26. D. M. Ruthven and K. F. Loughlin, *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* **168**, 696 (1972).
27. S. Brunauer, P. H. Emmett, and E. Teller, *J. Am. Chem. Soc.* 60, 309 (1938).
28. D. M. Young and A. D. Crowell, *Physical Adsorption of Gases*. Butterworths, London, 1962, p. 190.
29. S. J. Gregg and K. S. W. Sing, *Adsorption Surface and Porosity*. Academic Press, London, 1967, p. 160.
30. A.G. Foster, *J. Chem. Soc. (London)*, 1806 (1952).
31. L. H. Cohan, *J. Am. Chem. Soc.* 60, 433 (1938).
32. P. Zwietering, in *The Structure and Properties of Porous Solids*. Butterworths, London, 1958, p. 287,
33. F. A. L. Dullien, *Porous Media*. Academic Press, New York, 1979, Chap. IH.
34. W. S. Kyte, Ph.D. thesis, University of Cambridge, 1970.
35. R. M. Barrer and J. L. Whiteman, *J. Chern. Soc, A*, 13 (1967).
36. H. Lechert, *Physical Characterization of Zeolites*, in Proceedings of NATO ASI, Sintra Estoril, Portugal, May 1983. Martinus Nijhoff, the Hague, Holland.

РОЗДІЛ 2

ТЕРМОДИНАМІКА АДСОРБЦІЇ

Термодинамічний підхід до дослідження рівноваги досить загальний і може застосовуватися до адсорбції так само, як до будь-якої іншої фазової рівноваги. Загальне припущення, яке неявно в такому підході, полягає в тому, що шар, що адсорбується, можна розглядати як окрему фазу в термодинамічному сенсі. Це в цілому вірно, навіть якщо точне розташування фази межа може бути дещо невизначеним. Сьогоднішнє розуміння класичної термодинаміки адсорбції обумовлена в основному працею Хілла і Еверетта [1-4].

Інше застосування термодинамічних принципів адсорбційної рівноваги ґрунтується на розгляді поверхневого шару, що складається з адсорбенту та адсорбату як єдиної фази, що має загальні властивості [5-6]. Альтернативним є розгляд термодинамічних та геометричних властивостей адсорбенту як незалежної від температури і тиску навколишнього газу і концентрації адсорбованих молекул, тоді адсорбент може розглядатися як термодинамічно інертний. У цих умовах адсорбовані молекули самі по собі можна розглядати як окрему фазу і ефект адсорбенту обмежується виникненням силового поля, детальний характер якого не потрібно описувати. Ця думка спочатку сформульована і застосована Гіббсом [7]. Більш детальна інформація може бути отримана з формули Гіббса.

2.1. Термодинаміка адсорбованої фази

2.1.1. Класична рівноважність

Який вид вигляду адсорбованої фази приймається як умова для рівноваги між адсорбованою фазою та навколишньою газовою фазою. тобто

$$\mu_s = \mu_g. \quad (2.1)$$

Цей взаємозв'язок застосовується і тоді, коли адсорбція здійснюється з рідкої фази, оскільки при рівновазі хімічні потенціали адсорбованих видів в усіх трьох фазах повинні бути рівними. Описуючи ідеальну парову фазу, можна записати

$$\mu_s = \mu_g = \mu_g^0 + RT \ln \left(\frac{p}{p^0} \right), \quad (2.2)$$

де μ_g^0 - стандартний хімічний потенціал парової фази, тобто хімічний потенціал при сталому тиску p^0 . Диференціюючи при постійній

адсорбованій фазовій концентрації (q) та застосовуючи співвідношення Гіббса – Гельмгольца $\left[\partial(\mu/T) / \partial T = -\bar{H} / T^2 \right]$, отримаємо

$$-\frac{\bar{H}_s}{T^2} = -\frac{\bar{H}_g^0}{T^2} + R \left(\frac{\partial \ln p}{\partial T} \right)_q, \quad (2.3)$$

$$\left(\frac{\partial \ln p}{\partial T} \right)_q = \frac{H_g^0 - \bar{H}_s}{RT^2} = \frac{\bar{H}_g - \bar{H}_s}{RT^2} = \frac{-\Delta H_s}{RT^2} \quad (2.4)$$

оскільки для ідеальної парової фази часткова молярна ентальпія \bar{H}_g ; не залежить від концентрації і ідентична молярній ентальпії H_g . ΔH_s - зміна ентальпії при адсорбції, $-\Delta H_s = \bar{H}_g - \bar{H}_s$ в загальному називають ізотермічною теплотою адсорбції. H_g і, отже, ΔH_s є функції адсорбованої фазової концентрації q .

Якщо різницею в теплоємності асорбату в адсорбованих і паровій фазах можна знехтувати. ΔH_s не залежить від температури тоді рівняння. (2.4) може бути проінтегрованим безпосередньо, що дає

$$\ln p = \text{const} - \frac{\Delta H_s}{RT}. \quad (2.5)$$

Припускаючи, що наведене вище наближення щодо теплоємності є дійсним, графік залежності $\ln p$ від $1/T$ повинен дати лінійну ізотеру нахилу $(-\Delta H_s)$. Це простий і практично корисний метод визначення ізотермічної кількості теплоти. Ізотермічна кількість теплоти є також теплотою, яка буде передана в навколишнє середовище при передачі певної кількості адсорбату з парової фази до адсорбованої фази в ізотермічних та ізобарних умовах. У подібному диференціальному калориметричному вимірюванні, що здійснюється при постійному об'ємі, тепло, що виділяється у тепловий резервуар, буде $\bar{H}_g - U_s$. Цю кількість ще називають диференціальною теплотою адсорбції (або ж це різниця частковою і молярною внутрішньою енергіями).

З визначення ентальпії для ідеальної парової фази маємо :

$$H_g = U_s + PV = U_s + RT, \quad (2.6)$$

оскільки об'єм адсорбованої фази є незначним у порівнянні з об'ємом пари

$$\bar{U}_s \approx \bar{H}_s, \quad -\Delta H_s = U_g - \bar{U}_s + RT. \quad (2.7)$$

Оскільки $\mu = \bar{H} - T\bar{S}$, із рівняння (2.1) слідує, що при рівновазі:

$$\bar{S}_s - \bar{S}_g = \frac{\bar{H}_s - H_g}{T}. \quad (2.8)$$

Часткова молярна ентропія ідеальної парової фази визначається як

$$\bar{S}_g = S_g^0 - R \ln \frac{p}{p^0}, \quad (2.9)$$

де S_g^0 - молярна ентропія пари в стандартному стані при тиску p^0 . Отже, часткова молярна ентропія адсорбованої фази може бути розрахована безпосередньо з експериментальної ізотерми рівноваги після знаходження концентраційної залежності ізотермічної теплоти:

$$\bar{S}_s - S_g^0 = \frac{\bar{H}_s - H_g}{T} - R \ln \frac{p}{p^0}. \quad (2.10)$$

Стандартний стан адсорбованої фази та відповідну константу адсорбційної рівноваги можна визначити :

$$\mu_s = \mu_s^* + RT \ln \left(\frac{a_s}{a_s^0} \right), \quad (2.11)$$

де a_s це активність адсорбованої фази, μ_s^* - є стандартний хімічний потенціал при активності a_s^0 . З рівняння (2.2) слідує, що:

$$\mu_s^* = \mu_g^0 + RT \ln \left(\frac{p}{p^0} \frac{a_s^0}{a_s} \right), \quad (2.12)$$

звідки видно, що константу адсорбційної рівноваги:

$$K'' = \frac{p^0 a_s}{p a_s^0}. \quad (2.13)$$

Якщо стандартний стан приймається за адіабатично збурену на нескінченності ідеальну адсорбовану фазу, то рівняння (2.13) зводиться просто до закону Генрі за низької концентрації і при більш високих концентраціях з нього визначається коефіцієнт активності адсорбованої фази (γ):

$$\lim_{p \rightarrow 0} \frac{q}{p} = \frac{K'' a_s^0}{p^0} \equiv K', \quad \gamma = \frac{K' p}{q}. \quad (2.14)$$

Температурна залежність K' отримується з рівняння Вант-Гоффа [Рівняння. (1.19)].

2.1.2. Тиск розширення

У термодинамічному формулюванні об'ємних фаз фундаментальне диференціальне рівняння, яке є узагальненням першого і другого закону термодинаміки, має вигляд:

$$dU = TdS - PdV + \sum \mu_i dn_i . \quad (2.15)$$

Інтегрування цього рівняння, що містить змінні T , P , та константу μ дає

$$U = TS - PV + \sum \mu_i n_i \quad (2.16)$$

Якщо розглядати адсорбовану фазу як розчин n_s молів сорбату і n_a молів нелеткого адсорбенту, рівняння. (2. 15) набуває вигляду

$$dU = TdS - PdV + \mu_a dn_a + \mu_s dn_s . \quad (2.17)$$

Для адсорбенту за відсутності сорбату ми можемо записати:

$$dU_{0a} = TdS_{0a} - PdV_{0a} + \mu_{0a} dn_a . \quad (2.18)$$

і знаходячи різницю рівнянь (2.17) і (2.18):

$$dU_s = TdS_s - PdV_s + \mu_s dn_s , \quad (2.19)$$

де $U_s \equiv U - U_{0a}$, $V_s \equiv V - V_{0a}$, $S_s \equiv S - S_{0a}$, $-\Phi = \mu_a - \mu_{0a}$. Поки що ці величини не мають особливого значення, але якщо ми тепер приймаємо вигляд Гіббса і розглядаємо n_a молів адсорбенту термодинамічно інертними, ці величини, визначені різницею, стають просто термодинамічними властивостями адсорбованої фази, оскільки будь-який вплив адсорбенту є усувається при відніманні. Для прикладу, U_s тепер відноситься до внутрішньої енергії n_s молів адсорбату в потенціальному полі адсорбенту.

Значення функції Φ визначене далі:

$$\Phi \equiv \mu_{0a} - \mu_a = \left(\frac{\partial U_{0a}}{\partial n_a} \right)_{S_s, V_s, n_{sa}} - \left(\frac{\partial U}{\partial n_a} \right)_{S_s, V_s, n_s} = - \left(\frac{\partial U_s}{\partial n_a} \right)_{S_s, V_s, n_s} . \quad (2.20)$$

Функція Φ є зміною внутрішньої енергії, розрахованою на одиницю адсорбенту внаслідок розповсюдження адсорбату над поверхнею або через об'єм мікропор адсорбенту. Для адсорбції на двовимірній поверхні, площа поверхні A є прямо пропорційною до n_a тоді як для адсорбції в тривимірному мікропористому адсорбенті об'єм мікропор V_m є пропорційним до n_a . Тоді можна записати:

$$\Phi dn_a = \pi dA = \varphi dV_m . \quad (2.21)$$

де π і φ це відповідно двовимірний або тривимірний тиск розповсюдження, визначені як

$$\pi = - \left(\frac{\partial U_s}{\partial A} \right)_{S_s, V_s, n_s} , \quad \varphi = - \left(\frac{\partial U_s}{\partial V_m} \right)_{S_s, V_s, n_s} . \quad (2.22)$$

Визначений у такий спосіб π відповідає різниці поверхневого натягу між чистою поверхнею і поверхнею, покритою адсорбатом. Підхід до тиску розширення як відповідної інтенсивної змінної для обговорення поверхневої адсорбції була вперше запропонований Гіббсом. Але у формулюванні Гіббса мається на увазі двовимірна адсорбована фаза, яка є надмірно обмежена. По суті, ті ж термодинамічні співвідношення можуть бути тримані з точки зору поверхневої енергії, цей підхід має ту перевагу, що він в рівній мірі застосовний до двовимірної поверхневої адсорбції або ж тривимірної адсорбції в мікропористій твердому тілі.

Як і у масовій фазі, фундаментальні термодинамічні рівняння, що представляють об'єднаний перший і другий закони термодинаміки, можуть бути записані чотирма еквівалентними способами в термінах внутрішньої енергії, ентальпії, вільної енергії Гельмгольца або вільної енергії Гіббса. Для адсорбованої фази

$$\begin{aligned} dU_s &= TdS_s - PdV_s - \Phi dn_a + \mu_s dn_s \\ dH_s &= TdS_s + V_s dP - \Phi dn_a + \mu_s dn_s \\ dA_s &= -S_s dT - PdV_s - \Phi dn_a + \mu_s dn_s \\ dG_s &= S_s dT - V_s dP - \Phi dn_a + \mu_s dn_s \end{aligned} \quad (2.23)$$

Оскільки об'єм адсорбованої фази є дуже малим у порівнянні з обсягом парової фази, то доданком PdV_s можна знехтувати, і рівняння (2.23) можна інтегрувати з усіма інтенсивними змінними, постійними, що дає

$$\begin{aligned} U_s &= U_s(S_s, V_s, n_a, n_s) = TS_s - \Phi n_a + \mu_s n_s \\ H_s &= H_s(S_s, P, n_a, n_s) = TS_s - \Phi n_a + \mu_s n_s \\ A_s &= A_s(T_s, V_s, n_a, n_s) = -\Phi n_a + \mu_s n_s \\ G_s &= G_s(T_s, P, n_a, n_s) = -\Phi n_a + \mu_s n_s \end{aligned} \quad (2.24)$$

З формули (2.24) безпосередньо впливають чотири еквівалентні означення для Φ і μ_s :

$$\begin{aligned} \Phi &\equiv -\left(\frac{\partial U_s}{\partial n_a}\right)_{S_s, V_s, n_s} = -\left(\frac{\partial H_s}{\partial n_a}\right)_{S_s, P, n_s} = -\left(\frac{\partial A_s}{\partial n_a}\right)_{T_s, V_s, n_s} = -\left(\frac{\partial G_s}{\partial n_a}\right)_{T_s, P, n_s} \\ \mu &\equiv -\left(\frac{\partial U_s}{\partial n_s}\right)_{S_s, V_s, n_a} = -\left(\frac{\partial H_s}{\partial n_s}\right)_{S_s, P, n_a} = -\left(\frac{\partial A_s}{\partial n_s}\right)_{T_s, V_s, n_a} = -\left(\frac{\partial G_s}{\partial n_s}\right)_{T_s, P, n_a} \end{aligned} \quad (2.25)$$

З цих рівнянь видно, що для визначення кожної екстенсивної термодинамічної характеристики необхідні чотири незалежні змінні, тоді як у звичайній тривимірній термодинаміці для однокомпонентної системи потрібні

лише три змінні. Додатковою змінною, звичайно, є загальна площа поверхні або кількість адсорбенту, над яким розподіляються n_s молів адсорбату.

В термодинамічному аналізі об'ємних фаз P і T є найбільш зручними інтенсивними змінними, і оскільки критерій рівноваги при постійних P і T є мінімальною енергією Гіббса, рівноважні відношення зазвичай представляються в термінах G . Для адсорбованої фази тиск не є значною інтенсивною змінною; термодинамічні властивості визначаються за допомогою T і Φ (або π), а не T і P . Хілл та Еверетт уважали логічним ввести нову вільну енергію (F_s), визначену аналогією з $G = H + PV$

$$F_s = A_s + \Phi n_a = A_s + \pi V_m \approx G_s + \pi V_m. \quad (2.26)$$

З цим визначенням стан рівноваги при постійній T та Φ (або T і π) F_s має мінімальне значення. Всі термодинамічні співвідношення, тримані для об'ємної фази за допомогою G , застосовуються до адсорбованої фази з G , P , і V , замінами на F_s , Φ , і n_a чи еквівалентно F_s , π та A . Зокрема:

$$\begin{aligned} dF_s &= dA_s + \Phi dn_a + n_a d\Phi = dA_s + \pi dV_m + V_m d\pi \\ &= -S_s dT + n_a d\Phi + \mu_s dn_s = -S_s dT + V_m d\pi + \mu_s dn_s. \end{aligned} \quad (2.27)$$

2.1.3. Ізотерма адсорбції Гіббса

Отримання ізотерми адсорбції Гіббса з рівнянь (2.23) та (2.24) отримується у аналогічному підході, як і виведення рівняння Гіббса-Дюгема. При постійній температурі та нехтуванні доданком PdV_s , рівняння (2.23) дає

$$dA_s = -\Phi dn_a + \mu_s dn_s = -\pi d\alpha + \mu_s dn_s. \quad (2.28)$$

Диференціювання рівняння (2.24) дає

$$dA_s = -\Phi dn_a - n_a d\Phi + \mu_s dn_s + n_s d\mu_s \quad (2.29)$$

та підставляючи рівняння (2.28)

$$n_a d\Phi = V_m d\pi = V_m d\Phi = n_s d\mu_s. \quad (2.30)$$

Розглядаючи рівновагу між адсорбованою фазою та ідеальною паровою фазою, після диференціювання рівняння (2.2) отримуємо

$$d\mu_s = \frac{RTdp}{p}. \quad (2.31)$$

і тому

$$n_a \left(\frac{\partial \Phi}{\partial p} \right)_T = \frac{RT}{p} n_s \quad \text{чи} \quad V_m \left(\frac{\partial \pi}{\partial p} \right)_T = \frac{RT}{p} n_s, \quad (2.32)$$

що є ізотермою адсорбції Гіббса. Як зазначено в рівнянні (2.21) змінні (Φ, n_a) , (π, V_m) , і (φ, V_m) є еквівалентними і співвідношення у рівняннях (2.26) і (2.27) можуть бути записаними двома еквівалентними способами. Для економії простору і відповідно до умовних позначень наступні співвідношення подаються лише в термінах π і V_m , але звичайно, можуть бути записані еквівалентні вирази у позначення φ , V_m чи Φ , n_a при бажанні.

2.2. Отримання рівнянь ізотерм з рівняння Гіббса

Ізотерма адсорбції Гіббса забезпечує загальну зв'язок між тиском розширення (або енергією) та концентрацією адсорбованої фази. Проте ні тиск розширення, ні енергія не піддаються прямим експериментальним вимірюванням, і з практичної точки зору ми тим більше зацікавлені знаходженні зв'язку між концентрацією адсорбованої фази та рівноважним тиском пари. У однокомпонентній парофазній системі концентрація визначається температурою та тиском. Аналогічно, у однокомпонентній адсорбованій фазі концентрація визначається температурою та тиском розширення. Так само, як парова фазова система може характеризуватися рівнянням стану $V(p, T)$, тому адсорбована фаза може характеризуватися рівнянням стану в тиску розповсюдження $A(\pi, T)$ чи $V_m(\varphi, T)$.

2.2.1. Правило Генрі

Якщо рівняння стану для адсорбованої фази відповідає закону ідеального газу

$$\pi A = n_s RT. \quad (2.33)$$

Тоді з ізотерми Гіббса [рівняння (2.32)]

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial \pi}{\partial p} \right)_T &= \frac{\pi}{p} \\ \pi &= K' p \\ q &= \frac{n_s}{V_m} = \frac{K' p}{RT} = Kc \end{aligned} \quad (2.34)$$

Таким чином, лінійна залежність між тиском і концентрацією для адсорбованої фази (закон Генрі) еквівалентний рівнянню стану ідеального газу для адсорбованого шару в термінах тиску розширення.

2.2.2. Ізотерма Ленгмюра

При на порядок вищих концентраціях можна постулювати рівняння стану, що має вигляд

$$\pi(V_m - \beta) = n_s RT \quad (2.35)$$

за аналогією з рівнянням $P(V - b) = nRT$;

$$\left(\frac{\partial \pi}{\partial V_m} \right)_T = \frac{-n_s RT}{(V_m - \beta)^2} \quad (2.36)$$

з використанням ізотерми Гіббса [рівняння (2.32)]

$$\frac{dp}{p} = - \frac{V_m dV_m}{(V_m - \beta)^2}. \quad (2.37)$$

Якщо ми припустимо, що $\beta \ll 2V_m$, що є обґрунтованим припущенням при низьких концентраціях і знехтуємо доданком β^2 в знаменнику рівняння (2.37), це рівняння після інтегрування набуває вигляду:

$$bp = \frac{2\beta/V_m}{1 - 2\beta/V_m} = \left(\frac{\Theta}{1 - \Theta} \right) \quad (2.38)$$

ідентичного ізотермі Ленгмюра [рівняння (1.28)] якщо прийняти $\Theta = 2\beta/V_m$.

2.2.3. Ізотерма Вольмера

Якщо ми робимо апроксимації відносної величини β/V_m та інтегруємо рівняння (2.37) безпосередньо, позначивши $\Theta = \beta/V_m$, ми отримуємо рівняння ізотерми Вольмера:

$$bp = \left(\frac{\Theta}{1 - \Theta} \right) \exp \left(\frac{\Theta}{1 - \Theta} \right). \quad (2.39)$$

2.2.4. Ізотерма Ван дер Ваальса

Припущення про рівняння Ван дер Ваальса для адсорбованої фази дає:

$$\left(\pi + \frac{a}{V_m^2} \right) (V_m - \beta) = n_s RT \quad (2.40)$$

веде з використанням аналогічних викладок до рівняння ізотерми:

$$bp = \left(\frac{\Theta}{1-\Theta} \right) \exp \left(\frac{\Theta}{1-\Theta} \right) \exp \left(\frac{a' \Theta}{RT} \right), \quad (2.41)$$

де $a' = 2aq_m$.

2.2.5. Ізотерма віріалу

Далі, розглянемо адсорбований шар, для якого справедливе загальне рівняння стану у віріальній формі

$$\frac{\pi}{n_s RT} = 1 + A_1 n_s + A_2 n_s^2 + A_3 n_s^3 \dots \quad (2.42)$$

Подібним чином, використання рівняння Гіббса приводить до рівняння ізотерми віріалу

$$\frac{bp}{n_s} = \exp \left(2A_1 n_s + \frac{3}{2} A_2 n_s^2 + \dots \right). \quad (2.43)$$

Отриманий вираз є основою дуже корисного підходу оцінки констант Генрі з експериментальних ізотерм.

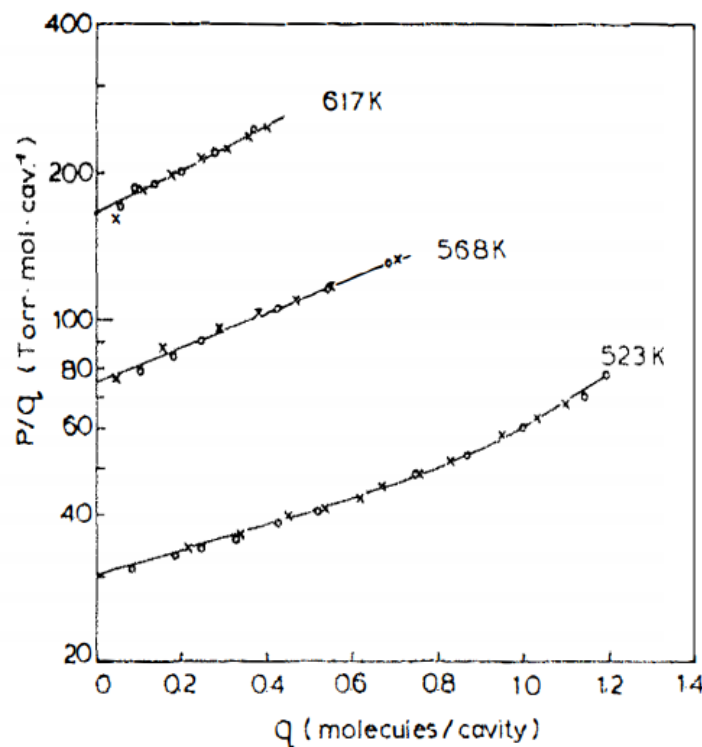


Рисунок 2.1. Віріальний графік залежності $\log(p/q)$ від q для пентану в 5А цеоліті показуючий екстраполяцію для знаходження константи Генрі [1-10]

При сильно адсорбованих компонентах здійснити надійні експериментальні вимірювання при досить низькому тиску може бути складно, щоб можна було

визначити константу закону Генрі безпосередньо з граничного нахилу ізотерми. Відповідно до рівняння (2.43), графік залежності $\ln(p/n_s)$ від n_s повинен бути лінійним у концентраціях, значно перевищують обмеження закону Генрі, тому екстраполяція такого графіка на концентрацію нульової адсорбованої фази забезпечує простий метод визначення постійної Генрі. Застосування цього методу демонструє рис. 2.1.

2.3. Адсорбція сумішей

2.3.1. Підхід Меєрса і Праушніца

Коефіцієнт активності для компоненти i у фазовому просторі визначається як [11]

$$\Delta G^m = G(T, P, X_1, X_2, \dots) - \sum X_i G_i^o(T, P) = RT \sum X_i \ln(\gamma_i X_i), \quad (2.44)$$

де $G(T, P, X_1, X_2, \dots)$ це молярна вільна енергія суміші і $G_i^o(T, P)$ це молярна вільна енергія чистих компонентів при однаковій температурі і тиску. Для рідкої або твердої фази специфікація постійного тиску незначна, оскільки вільна енергія об'ємної рідини або твердого тіла практично не залежить від тиску. Враховуючи, що відповідними інтенсивними змінними для адсорбованої фази є T і π , то логічно визначити коефіцієнти активності для адсорбованої суміші як

$$\Delta F_s^m = F_s(T, \pi, X_1, X_2, \dots) - \sum X_i F_i^o(T, \pi) = RT \sum X_i \ln(\gamma_i X_i). \quad (2.45)$$

Визначена таким чином, ΔF_s^m - різниця між молекулярною вільною енергією змішаної адсорбованої фази та відповідною величиною для чистих компонентів у однокомпонентній адсорбованій фазі при однаковій температурі та тиску розширення. Оскільки вільна енергія адсорбованої фази є набагато більш чутливою до π , ніж об'ємна рідина або тверда фаза, до тиску P , то важливе значення має значення постійного тиску розширення у визначенні стандартного стану.

Вираз для хімічного потенціалу отримується диференціюванням формули (2.45) при постійній температурі та тиску розширення:

$$\mu_i(T, \pi, X_1, X_2, \dots) = F_i^o(T, \pi) + RT \ln(\gamma_i X_i) \quad (2.46)$$

Розглядаючи рівновагу з паровою фазою (яка вважається ідеальною) ми маємо для чистої компоненти

$$F_i^o(T, \pi) = \mu_i^o(T) + RT \ln[p_i^o(\pi)] \quad (2.47)$$

і для суміші

$$\begin{aligned}\mu_i(T, \pi, X_1, X_2, \dots) &= \mu_i^o(T) + RT \ln [p_i^o(\pi)] + RT \ln(\gamma_i X_i), \\ &= \mu_i^o(T) + RT \ln p\end{aligned}\quad (2.48)$$

де $\mu_i^o(T)$ є стандартним хімічним потенціалом для i -ої компоненти у паровій фазі при одиничному тиску. Це впливає з рівності

$$p_i = p_i^o(\pi) \gamma_i X_i. \quad (2.49)$$

Для однокомпонентної системи взаємозв'язок між тиском розширення і концентрацією адсорбованої фази може бути отриманим безпосередньо шляхом інтегрування ізотерми адсорбції Гіббса [Рівняння. (2.32)]:

$$\frac{\pi V_m}{RT} = \int_0^{p_i^o} q^o(p) \frac{dp}{p}, \quad (2.50)$$

де $q^o(p)$ - ізотерма рівноваги для чистої компоненти: З рівняння (2.30) може бути написана ізотерма Гіббса для бінарної суміші

$$V_m d\pi = q_1 d\mu_1 + q_2 d\mu_2 \quad (2.51)$$

і враховуючи рівновагу з (ідеальною) паровою фазою

$$\frac{V_m d\pi}{RT} = q_1 d \ln p_1 + q_2 d \ln p_2 \quad (2.52)$$

чи при постійному повному тиску P

$$\frac{V_m d\pi}{RT} = q_1 d \ln Y_1 + q_2 d \ln Y_2. \quad (2.53)$$

Для розрахунку тиску розширення для адсорбованої суміші при заданій температурі і загальному тиску і складу пари необхідною є рівновага параметрів при цьому загальному тиску і температурі на усьому діапазоні складу пари, що забезпечить інтегрування рівняння (2.53). Знаючи тиск розширення суміші та співвідношення між тиском розширення і p_i^o з рівняння (2.50) коефіцієнт активності для адсорбованої фази може бути розрахований безпосередньо з рівняння (2.49). Проте, немає очевидного способу передбачити коефіцієнти активності для змішаної адсорбованої фази з аналізу однокомпонентних даних ізотерми. Таким чином, даний підхід дає засіб прогнозування рівноваги суміші лише в особливому випадку ідеальної адсорбованої фази.

При постійній температурі і тиску розширення ми маємо (рівняння (2.30) чи (2.51):

$$\sum X_i d\mu_i = 0 \quad (2.54)$$

з урахуванням рівняння (2.48)

$$\sum X_i d \ln \gamma_i = 0 \text{ (константи } \pi, T), \quad (2.55)$$

яке є аналогом рівняння Гіббса-Дюгема для адсорбованої фази і забезпечує засіб перевірки термодинамічної консистенції подвійних (і багатокомпонентних) рівноважних даних.

Дещо інше визначення було введено Бронтоном [11-16], який визначив коефіцієнт активності (γ_i') як відношення рівноважного тиску i -ої компоненти у суміші до рівноважного тиску для чистих адсорбованих компонент при однаковій температурі та концентрації, яка дорівнює загальній концентрації адсорбованої фази для суміші:

$$\gamma_i' = \frac{p_i(n_i, n_j, \dots)}{p_i^o(n_i^o = \sum n_i)} . \quad (2.56)$$

Якщо тиск розширення залежить тільки від загальної концентрації адсорбованої фази, що може бути хорошим наближенням для багатьох систем, це визначення еквівалентно визначенню Майерса та Прауніца [рівняння (2.49)]. Умовою термодинамічної узгодженості з цим визначенням коефіцієнтів активності є

$$\int_0^1 \ln \gamma_i' dX_1 = \int_0^1 \ln \gamma_2' dX_2 \quad (\text{константи } P, T) . \quad (2.57)$$

2.3.2. Теорія розв'язування вакансій

Теорія розв'язування вакансій була розроблена Сувануауеном та Деннером [13-15] як методом прогнозування багатокомпонентних рівноваг адсорбції від однокомпонентних ізотерм без припущення ідеальної адсорбованої фази. Замість того, щоб включити доданок з малим внеском πV_m безпосередньо в визначення вільної енергії адсорбованої фази (рівняння (2.26)) можна скористатися безпосередньо рівнянням (2.24), записаним у термінах тиску розширення, звідки

$$G_s = \mu_s(T, \pi) n_s - \pi V_m . \quad (2.58)$$

Диференціюючи при постійній температурі та тиску розширення, ми можемо визначити часткову молярну вільну енергію або хімічний потенціал за співвідношенням

$$\mu_s'(T, \bar{V}_m) = \left(\frac{\partial G_s}{\partial n_s} \right)_{T, \pi} = \mu_s(T, \pi) - \pi \bar{V}_m , \quad (2.59)$$

де $\bar{V}_m = (\partial V_m / \partial n_s)_{T, \pi}$ це частинна молярна площа. Якщо, слідуючи Сувануаюену та Даннеру, адсорбована фаза розглядається як суміш сорбату та вакансій, ми

можемо виразити цей хімічний потенціал звичайним способом з точки зору стандартного хімічного потенціалу та активності:

$$\begin{aligned}\mu'_s &= \mu_s^\circ(T) + RT \ln(\gamma_v X_v) \\ \mu'_s &= \mu_s^\circ(T) + RT \ln(\gamma_v X_v) + \pi \bar{V}_m,\end{aligned}\quad (2.60)$$

де $\gamma_v X_v$ - активність вакансій. Стандартний стан приймається як нескінченно розбавлена адсорбована фаза, для якої $\gamma_v \rightarrow 1.0$; $X_v \rightarrow 1.0$, і $\pi \rightarrow 0$. Тоді рівняння стану адсорбованої фази набуває виду

$$\frac{\pi \bar{V}_m}{RT} = -\ln(\gamma_v X_v) = -\ln[\gamma_v (1 - \Theta)], \quad (2.61)$$

де Θ це частка охоплення насиченості. Рівняння для ізотерми рівноваги можна отримати з ізотерми адсорбції Гіббса [рівняння. (2.32)], виражаючи вираз концентраційної залежності коефіцієнта активності вакансій. Якщо ми вважаємо, що рішення вакансії є ідеальним ($\gamma_v = 1$) отримуємо з рівнянь (2.32) і (2.61)

$$\frac{\bar{V}_m}{RT} \left(\frac{\partial \pi}{\partial p} \right)_T = \frac{1}{(1 - \Theta)} \left(\frac{\partial \Theta}{\partial p} \right)_T = \frac{\Theta}{p}, \quad (2.62)$$

яке може бути проінтегроване при постійній температурі, що дає ізотерму Ленгмюра:

$$\int \frac{d\Theta}{\Theta(1 - \Theta)} = \int \frac{dp}{p}, \quad \frac{\Theta}{1 - \Theta} = bp. \quad (2.63)$$

В якості відхилення першого порядку від ідеальної поведінки можна припустити, що адсорбована фаза підпорядковується моделі ідеального розчину:

$$RT \ln \gamma_v = w(1 - X_v)^2 = w\Theta^2, \quad (2.64)$$

$$\frac{\pi \bar{V}_m}{RT} = -\frac{w}{RT} \Theta^2 - \ln(1 - \Theta). \quad (2.65)$$

Аналогічно, використовуючи ізотерму Гіббса [15] (2.65) призводить до рівняння ізотерми

$$bp = \frac{\Theta}{1 - \Theta} \exp\left(-\frac{2w\Theta}{RT}\right). \quad (2.66)$$

Цей самий вираз був статистично виведений Фаулером [14] для невеликих відхилень від ідеальної локалізованої адсорбції, в яких ефекти взаємодії сорбат-сорбат є значними, але не достатньо великими, щоб перешкоджати випадковому розподілу адсорбату над поверхневими ділянками. У цьому формулюванні концентраційна залежність коефіцієнта активності описується

однопараметричним виразом [рівняння (2.64)]. Щоб розширити аналіз, щоб описати більш виражені відхилення від ідеальної поведінки Ленгмюра, необхідно лише використовувати двопараметричний вираз для коефіцієнта активності. Деннер і Суванаяоен використовували вираз Вільсона [15, 16]:

$$\ln \gamma_v = -\ln[(1-\Theta) + \Lambda_1 \Theta] - \Theta \left(\frac{\Lambda_1'}{\Theta + \Lambda_1'(1-\Theta)} - \frac{\Lambda_1}{1-\Theta + \Lambda_1'} \right), \quad (2.67)$$

що приводить за аналогічних міркувань до рівняння ізотерми

$$bp = \frac{\Theta}{1-\Theta} \Lambda_1' \left(\frac{1-(1-\Lambda_1)\Theta}{\Lambda_1' + (1-\Lambda_1')\Theta} \right) \exp \left(-\frac{\Lambda_1(1-\Lambda_1)\Theta}{1-(1-\Lambda_1)\Theta} - \frac{(1-\Lambda_1')\Theta}{\Lambda_1' + (1-\Lambda_1')\Theta} \right), \quad (2.68)$$

але можуть також використовуватися інші вирази для коефіцієнта активності, такі як рівняння ван Лаара. Рівняння (2.68) містить чотири параметри ($b, \Lambda_1, \Lambda_1',$ і n_∞ що міститься в Θ) і здатний описати практично всі однокомпонентні ізотерми. Застосування приведеної теорії до адсорбованої суміші є можливим, хоча розрахунки досить громіздкі. Для кожного адсорбованого виду, припускаючи ідеальну парову фазу,

$$\begin{aligned} \mu_i &= \mu_{is}^\circ(T) + RT \ln(\gamma_i X_i') + \pi \bar{V}_m = \mu_{ig}^\circ(T) + RT \ln p_i \\ p_i &= \gamma_i X_i' \exp \left(\frac{\Delta G_i^\circ}{RT} + \frac{\pi \bar{V}_m}{RT} \right), \end{aligned} \quad (2.69)$$

де $\Delta G_i^\circ = \mu_{is}^\circ - \mu_{ig}^\circ$ і $X_i' = X_i \Theta$ це мольна частка i -ої компоненти в адсорбованій фазі, включаючи вакансії як можливий вид, X_i це фактична мольна доля в адсорбованій фазі, і $\Theta = n_m / n_{m\infty}$ це сумарне дрібне покриття, розраховане відносно межі насичення для суміші вказаного складу. $\Delta G_i^\circ / RT$ і $\pi \bar{V}_m / RT$ може бути отриманий з однокомпонентних ізотерм, тоді як коефіцієнт активності для змішаної фази може бути отриманий з параметрів Вільсона $\Lambda_1, \Lambda_1', \Lambda_2$, and Λ_2' і перехресних коефіцієнтів Λ_{12} і Λ_{12}' згідно з комбінаційною формулою, отриманою Прауснітцом [16]

$$\ln \gamma_k = 1 - \ln \left(\sum_{j=1}^n X_j \Lambda_{kj} \right) - \sum_{j=1}^n \left(\frac{X_j \Lambda_{jk}}{\sum_{i=1}^n X_i \Lambda_{ij}} \right). \quad (2.70)$$

Параметри $\Lambda_1, \Lambda_1', \Lambda_2$ і Λ_2' відомі з підгонки ізотерм для окремого компонента, але для оцінки перехресних коефіцієнтів Λ_{ik} потрібні додаткові припущення. Для багаточастинкових систем було встановлено, що перехресні коефіцієнти пов'язані між собою

$$\frac{\Lambda_{12}}{\Lambda_{21}} = \frac{\Lambda_1}{\Lambda'_1} \frac{\Lambda'_2}{\Lambda_2}.$$

Тому потрібен лише один параметр, крім тих, що отримані з однокомпонентних ізотерм. Для того, щоб показати взаємозв'язок з підходами Майєрса та Праушніца, ми будемо нехтувати вакансіями та розглянемо адсорбовану фазу просто як суміш адсорбованих компонент. Рівняння (2.69) набуває вигляду

$$p_i = \gamma_i X_i \exp\left(\frac{\mu_{is}^\circ - \mu_{ig}^\circ + \pi \bar{\lambda}_i}{RT}\right) \quad (2.71)$$

і для адсорбції i -ої компоненти окремо [15, 16, 35]:

$$p_i^\circ = \exp\left(\frac{\mu_{is}^\circ - \mu_{ig}^\circ + \pi^\circ \lambda_i^\circ}{RT}\right) \quad (2.72)$$

тобто

$$p_i = \gamma_i X_i p_i^\circ \exp\left(\frac{\pi \bar{\lambda}_i - \pi^\circ \lambda_i^\circ}{RT}\right). \quad (2.73)$$

Якщо виберемо стандартний такий, що $\pi = \pi^\circ$, $\bar{V}_i = V_i^\circ$ отримаємо рівняння (2.49). Отже, різниця між моделлю розчину вакансій та формулюваннями Майєрса та Праушніца полягає в виборі стандартного стану та способу вираження адсорбованих фазових концентрацій.

2.4. Статистичний термодинамічний підхід

Підхід до моделювання адсорбційної рівноваги, наведений у розділі 2.3, залежить від припущення про рухливу адсорбовану фазу, термодинамічна поведінка якої може бути представлена рівнянням стану. Альтернативний вигляд полягає в тому, щоб розглядати адсорбовані молекули як локалізовані на різних поверхневих ділянках, причому лише відносно рух молекул між ділянками є малоймовірним. Тоді кожна ділянка може розглядатися як окрема підсистема, а рівноважна поведінка може бути описана методами статистичної термодинаміки. Може бути показано, що в межах моделі, яка дозволяє швидкий обмін молекулами між ділянками, цей підхід приводить до тих же результатів, що й класичний підхід, який базується на ізотермії адсорбції Гіббса.

Статистичний підхід до адсорбції, який був розроблений переважно Фаулером і Гуггенхаймом [14] та Хіллом [4], залежить від представлення адсорбованих видів в термінах спрощеної фізичної моделі, для якої може бути отриманий відповідний вираз для статистичної суми. Термодинамічні властивості

тоді оримуються, з використанням встановлених зв'язків між функціями розподілу та класичними термодинамічними властивостями.

2.4.1. Елементарне статистичне визначення ізотерми Ленгмюра

Як ілюстрацію статистичного методу в найпростішому випадку ми можемо розглянути виведення ізотерми Ленгмюра. Модель Ленгмюра ґрунтується на припущенні про фіксовану кількість ідентичних ділянок без взаємодії між адсорбованими молекулами. Розглянемо множину M еквівалентних ділянок на яких розміщено N адсорбованих молекул ($N < M$). Канонічна статистична сума для системи задається виразом

$$F = \int^N \frac{M!}{N!(M-N)!} \cdot \quad (2.74)$$

В цьому виразі \int молекулярна статистична функція для окремої молекули, а множник $M!/N!(M-N)!$ це просто фактор виродження або ж кількість способів, за допомогою яких N -ідентичних молекул можуть бути розташовані на M -ділянках, що є фізично різними. Оскільки M та N - великі числа, ми можемо використовувати теорему Стірлінга ($\ln N! = N \ln N - N$) і тоді:

$$\ln F = M \ln M - N \ln N - (M - N) \ln(M - N) + N \ln f. \quad (2.75)$$

Використовуючи співвідношення

$$\frac{\mu}{kT} = - \left(\frac{\partial \ln F}{\partial N} \right)_{M,T} = \ln \left(\frac{N}{M - N} \right) - \ln f = \ln \left[\frac{\Theta}{(1 - \Theta)f} \right], \text{ де } \Theta = N / M \quad (2.76)$$

і враховуючи рівновагу між адсорбованою та газовою фазами:

$$\frac{\mu}{kT} = \frac{\mu^\circ}{kT} + \ln p = \ln \left[\frac{\Theta}{(1 - \Theta)f} \right], \quad (2.77)$$

$$bp = \frac{\Theta}{1 - \Theta} \text{ чи } \Theta = \frac{bp}{1 + bp}, \quad (2.78)$$

де $b(T) = f(T) e^{\mu^\circ/kT}$ - константа рівноваги.

2.4.2. Застосування "Функції великого канонічного розподілу"

У вищезгаданому виведенні рівняння Ленгмюра ми змогли виходити безпосередньо з канонічної статистичної суми, але в більш складних системах, таких як ті, які описують взаємодію між молекулами на сусідніх ділянках, цей підхід неможливий. Замість цього треба використати "функцію великого

канонічного розподілу." Функція великого канонічного розподілу (Z) це просто сума всіх канонічних функцій розділу взята з вагою $e^{N_\mu/kT}$. Середня кількість молекул у кожній підсистемі визначається як

$$\bar{N} = \lambda \frac{\partial \ln Z}{\partial \lambda}. \quad (2.79)$$

де $\lambda = \exp(\mu/kT)$, $\Xi = \sum F e^{N_\mu/kT}$.

Отже, при застосуванні цього методу ми знову проходимо до рівняння Ленгмюра. Для ідеальної адгезії Ленгмюра

$$F = \frac{M!}{N!(M-N)!} \int^N, \quad (2.80)$$

$$\Xi = \sum \frac{M!}{N!(M-N)!} (f\lambda)^N = (1+f\lambda)^M. \quad (2.81)$$

Останнє з наведених рівнянь впливає безпосередньо з біномальної теореми.

$$\ln \Xi = M \ln(1+f\lambda), \quad (2.82)$$

$$\bar{N} = \lambda \frac{\partial \ln \Xi}{\partial \lambda} = \frac{\lambda M f}{1+f\lambda}, \quad (2.83)$$

чи

$$\Theta = \frac{N}{M} = \frac{\int \lambda}{1+\int \lambda} = \frac{bp}{1+bp}. \quad (2.84)$$

Багато модифікацій простої моделі Ленгмюра піддаються аналізу наступним чином. Наприклад, розглянемо адсорбцію на множині M незалежних пар ідентичних ділянок так, щоб там була енергія взаємодії ($2w$) виникає, коли обидві ділянки даної пари були зайняті. Вираз для великої статистичної суми для такої системи є

$$\Xi = 1 + 2f\lambda + f^2 e^{-2w/kT} \lambda^2, \quad (2.85)$$

звідки

$$\Theta = \frac{\bar{N}}{M} = \frac{2f\lambda + 2f^2 e^{-2w/kT} \lambda^2}{1 + 2f\lambda + 2f^2 e^{-2w/kT} \lambda^2}. \quad (2.86)$$

Ізотерма також може бути легко тримана через велику статистичну суму. Як і в моделі Ленгмюра, ми розглядаємо систему M незалежних ділянок без взаємодії між адсорбованими молекулами. Однак у даній моделі кожна ділянка першого адсорбованого шару вважається місцем для другого шару адсорбованих молекул і аналогічно для третього шару і т.д. Нехай функція розподілу для молекули в

першому адсорбованому шарі f_1 і для молекули у другому або наступному шарі, f_2 . Функція великого статистичного розподілу для такої системи задана

$$\Xi = 1 + f_1\lambda + f_1f_2\lambda^2 + f_1f_2^2\lambda^2 + \dots, \quad (2.87)$$

$$\Theta = \frac{\bar{N}}{M} = \frac{f_1\lambda(1 + 2f_2\lambda + 3f_2^2\lambda^2 + \dots)}{1 + f_1\lambda(1 + f_2\lambda + f_2^2\lambda^2 + \dots)}. \quad (2.88)$$

Підсумовуючи доданки дужках як геометричні прогресії, отримуємо

$$\frac{\bar{N}}{M} = \frac{f_1\lambda}{(1 - f_2\lambda)(1 - f_2\lambda + f_1\lambda)}, \quad (2.89)$$

де $\lambda = e^{\mu/kT} = e^{\mu_0/kT} p$, що є однією з форм рівняння (1.32).

Поверхневий потенціал Φ задається як

$$\Xi = e^{\Phi M/kT} = \xi^M \quad (2.90)$$

і тоді

$$\frac{\Phi}{kT} = \ln \xi = \ln\left(\frac{1 - f_2\lambda + f_1\lambda}{1 - f_2\lambda}\right). \quad (2.91)$$

Хілл зазначив, що з рівняння слідує, що $\Phi \rightarrow \infty$ якщо $f_2\lambda \rightarrow 1.0$ в тоді як термодинамічно Φ обов'язково скінченний $f_2\lambda = 1$, що є серйозним недоліком такої теорії.

2.4.3. Проста статистична модель ізотерм для цеолітів

Періодичність структури пор цеоліту робить ці адсорбенти особливо зручними для застосування методів статистичної термодинаміки. Даний підхід дотримувався декількома авторами, включаючи Рекерта [17], Бакаєва [18], Брауера [19] та Рутвена [20-23]. Цей метод найкраще підходить для тих цеолітів, структура яких складається з більш-менш дискретних кліток взаємозв'язані між собою відносно невеликими проміжками. У цих умовах кожна клітка може розглядатися як незалежна ділянка або підсистема, і, в першому наближенні, взаємодією між молекулами в сусідніх клітинах можна знехтувати. Морденіт - безпосередній приклад такої системи, оскільки кожна клітина може містити лише одну молекулу таких газів, як аргон або метан, і проходження через шари цеоліту відбувається повільно, щоб, за винятком дуже високих температур, переходи між клітинами відбуваються рідко. Тому не дивно, що при помірних температурах ізотерми таких систем точно відповідають ідеальній моделі Ленгмюра, оскільки основні припущення моделі чітко виконуються [24].

Клітини А і Х цеолітів більші і можуть вмістити кілька молекул. Швидкість обміну молекул між клітинами, особливо в Х-цеолітах, може бути швидкою, але в першому наближенні все ще доцільно розглядати клітки як незалежні підсистеми. Якщо розглядати M клітини і припустити, що кожна клітина може містити до m молекул, функція розподілу для канонічного ансамблю визначається шляхом

$$F(N, M, T) = \sum \frac{M! f(1)^{n_1} f(2)^{n_2} \dots}{n_0! n_1! \dots n_m!}, \quad (2.92)$$

де $f(s)$ являє собою функцію розділу для клітки, що містить молекули сортату. Функція великого канонічного розподілу для системи визначається як

$$\Xi = \left[f(0) + f(1)\lambda + f(2)\lambda^2 + \dots + f(m)\lambda^m \right]^M. \quad (2.93)$$

Цей результат може бути виражений через інтеграли конфігурацій $Z(s)$ для клітин, що містять 0, 1, ... молекул оскільки $f(s)\lambda^s = Z(s)a^s$.

$$\Xi = \left[1 + Z(1)a + Z(2)a^2 + \dots + Z(m)a^m \right]^M, \quad (2.94)$$

де, для ідеальної парової фази активність a виражається формулою p/kT .

Середня кількість молекул в клітці:

$$\bar{s} = \frac{\bar{N}}{M} = \frac{a \partial \ln \Xi}{\partial a} = \frac{\sum_{s=0}^m s Z(s) a^s}{\sum_{s=0}^m Z(s) a^s}. \quad (2.95)$$

Припущення про те, що молекули всередині даної клітини вільно рухаються і не взаємодіють один з одним, призводить до виразу:

$$Z(s) = \frac{Z(1)^s}{s!}. \quad (2.96)$$

Оскільки $Z(1)a = K'p$ ми отримуємо

$$Z(s)a^s = \frac{(K'p)^s}{s!} \quad (2.97)$$

і якщо кожна клітина може містити максимум m молекул, вираз для ізотерми стає

$$\bar{s} = \frac{\bar{N}}{M} = \frac{K'p + (K'p)^2 + (K'p)^3/2! + \dots + (K'p)^m/(m-1)!}{1 + K'p + (K'p)^2/2! + \dots + (K'p)^m/m!} \quad (2.98)$$

як отримано Рікером. Графіки рівняння (2.98) для різних значень m показано на рис. 2.2.

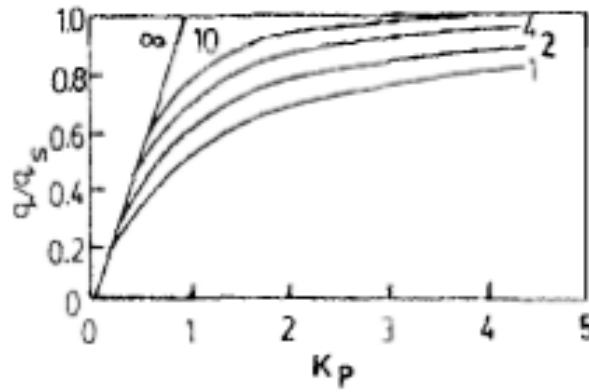


Рисунок 2.2. Теоретичні ізотерми, розраховані відповідно до рівняння (2.98) [17].

Припущення про відсутність взаємодії між адсорбованими молекулами є нереалістичним, оскільки, крім будь-яких можливих сил тяжіння, простір, доступний в клітці, зменшується, коли присутньо більше однієї молекули. Тому рівняння (2.97) слід замінити на

$$Z(s)a^s = \frac{(K'p)^s}{s!} A_s, \quad (2.99)$$

де A_s ($s = 2, 3, \dots$) коефіцієнти, які враховують взаємодію між молекулами. Ідеалізований випадок рівняння (2.98) відповідає $A_s = 1.0$. Якщо скорочення вільного об'єму є домінуючим ефектом взаємодії, то це можна вважати першим наближенням

$$A_s = \left(\frac{v - s\beta}{v} \right), \quad (2.100)$$

де v - об'єм клітини та β - ефективний об'єм молекули. Це дає рівняння ізотерми:

$$\frac{\bar{N}}{M} = \frac{K'p + (K'p)^2(1 - 2\beta/v)^2 + \dots + ((K'p)^m/(m-1)!(1 - s\beta/v)^m)}{1 + K'p + \frac{1}{2}(K'p)^2 + \dots + (1/m!)(K'p)^m(1 - s\beta/v)^m}, \quad (2.101)$$

де m це ціле число таке, що $m \leq v/\beta$. Цей вираз виявився корисним наближенням для ізотерм декількох малих неполярних молекул в цеолітах типу А, а також деяких інших системах. Застосування отриманої залежності до сумішей є простим. Зокрема для бінарної суміші компонент 1 і 2 отримується

$$q_1 = \frac{\bar{N}_1}{M} = \frac{K'_1 p_1 + \sum_j \sum_i [(K'_1 p_1)^i (K'_2 p_2)^j (1 - i\beta_1/v - j\beta_2/v)^{i+j}]/(i-1)! j!}{1 + K'_1 p_1 + K'_2 p_2 + \sum_j \sum_i [(K'_1 p_1)^i (K'_2 p_2)^j (1 - i\beta_1/v)^{i+j}]/(i)! j!} \quad (2.102)$$

з аналогічним виразом для компонента 2. У цих виразах підсумовування дві умови: $i + j \geq 2$ і $i\beta_1 + j\beta_2 \leq v$.

У цьому формулюванні не враховується зниження вільного об'єму, коли клітина містить лише одну молекулу адсорбату. Дещо більш логічним і послідовним є представити константу Генрі як добуток гіпотетичної константи для точкової молекули (K^*) та коефіцієнта зменшення вільного об'єму, який відображає розмір фактичної молекули, таким чином, щоб замість рівняння. (2.100) отримуємо:

$$K' = K^*(1 - \beta/\vartheta), A_s = \left[\frac{(1 - s\beta/\vartheta)}{(1 - \beta/\vartheta)} \right]^s \quad (2.103)$$

Це призводить до модифікованого рівняння ізотерми:

$$q = \frac{\bar{N}}{M} = \frac{K'p + (K'p)^2 \left(\frac{1 - 2\beta/\vartheta}{1 - \beta/\vartheta} \right) + \dots + \frac{(K'p)^m \left(\frac{1 - m\beta/\vartheta}{1 - \beta/\vartheta} \right)^m}{1 + K'p + \dots + \frac{(K'p)^m \left(\frac{1 - m\beta/\vartheta}{1 - \beta/\vartheta} \right)^m}{m!}}. \quad (2.104)$$

Існує невелика числова різниця між рівняннями. (2.101) і (2.104) крім випадків, коли m є малим. В обох рівняннях межа насичення визначається як $q_s = m - 1$. Для $\nu/\beta \leq 2$, гранична насиченість становить 1 молекула/клітка, і обидва вирази зводяться до форми Ленгмюра. Якщо ізотерми побудовані як q/q_s від $K'p/q_s$ (Рис. 3.3) ми отримаємо сімейство кривих, які показують плавний перехід від форми Ленгмюра (для $\nu/\beta \leq 2$) до форми Вольмера [Рівняння. (2.39)] коли ν/β є великим [22]. Це фізично обґрунтовано, оскільки $\nu/\beta \rightarrow \infty$ відповідає вільній рухливості в усьому вмісті мікропор адсорбенту, що є основою моделі Вольмера. Більш загальний вигляд вираження для рівноважної ізотерми може бути отриманий шляхом збереження коефіцієнтів A_s [Рівняння (2.99)] як параметрів [24]:

$$q = \frac{\bar{N}}{M} = \frac{1 + K'p + A_2(K'p)^2 + (A_3/2!)(K'p)^3 + \dots + (A_m/(m-1)!)(K'p)^m}{1 + K'p + A_2(K'p)^2/2! + A_3(K'p)^3/3! + \dots + A_m(K'p)^m/m!}. \quad (2.105)$$

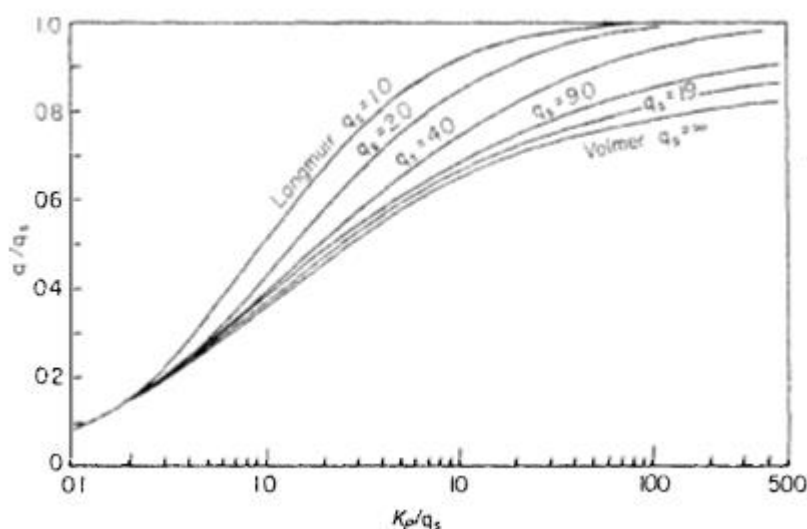


Рисунок 2.3. Теоретичні ізотерми розраховані за рівнянням (2.104), що показують перехід від форми Ленгмюра до форми Вольмера зі збільшенням m [25].

Значення цих коефіцієнтів можуть бути тримані безпосередньо за допомогою аналізу експериментальних даних ізотерм. Рівняння (2.105), таким чином, забезпечує корисну напівемпіричну кореляцію, в якій параметри мають просте і добре визначене фізичне значення. У цьому сенсі рівняння (2.105) можна порівняти з віріальною ізотермою [Рівняння (2.43)]. Загалом, коефіцієнти A_s залежать від температури, але ми виявили, що для багатьох неполярних сорбатів температурна залежність є слабкою. Для таких систем може бути отримана приблизна кореляція рівноважних даних у широкому діапазоні температур з єдиним набором постійних коефіцієнтів, беручи до уваги константу Генрі як єдиний температуро-залежний параметр.

2.5. Кореляція, аналіз, і прогноз адсорбційної рівноваги

Інформація щодо відповідних адсорбційних рівноваг, як правило, є необхідною вимогою для аналізу та проектування процесу адсорбційного розділення. У розділі 2 розглянуто адсорбційну рівновагу з термодинамічної перспективи та розробили ряд простих ідеалізованих формул для ізотерми рівноваги, заснованих на різних припущеннях щодо характеру адсорбованої фази. Розглянуто лише те, наскільки ці моделі можуть забезпечити корисне представлення поведінки реальних систем. Оскільки багато практичних адсорбційних систем передбачають одночасну адсорбцію більше ніж одного компонента, проблеми кореляції та прогнозування багатоконпонентної рівноваги компонентних даних мають особливе значення.

2.5.1. Локалізована адсорбція

2.5.1.1. Ідеальна модель Ленгмюра

Модель Ленгмюра ґрунтується на припущенні про ідеальну локалізовану адсорбцію без взаємодії на безлічі ідентичних сторін, як це викладено в розділі 2.4.

Особливий випадок сорбції CH_4 або Ar у содаліті було зазначено у розділі 2.5 як приклад системи, для якої основні припущення Ленгмюровської моделі насправді виконується, і для якої ізотерми збігаються, як і очікувалося, до рівняння Ленгмюра [Рівн. (1.28)]. Сорбція нормального триортетрадекану в цеоліті 5А є ще одним прикладом ціолітичної системи, в якій кожна пора може вмістити лише одну молекулу сорбату.

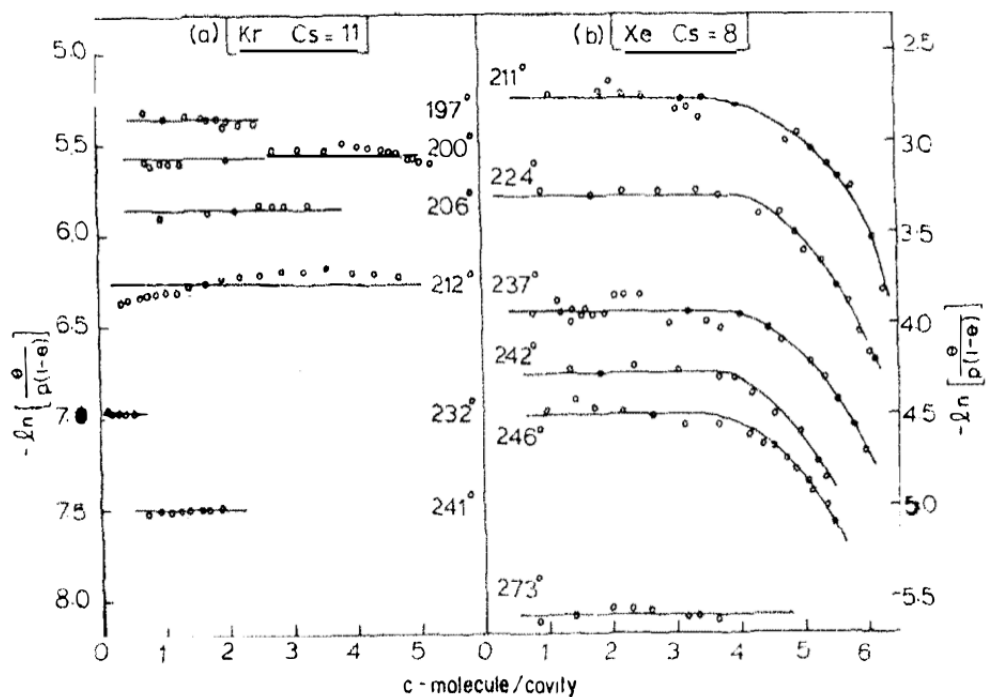


Рисунок 2.4. Константи Ленгмюра розраховуються відповідно до рівняння (2.78) для Kr і Xe в 5А цеоліту. (Температура в кельвінах, потужність насичення: Kr, $q=11$ молекули/пори, Xe, $q=8.0$ молекули/пори). [11]

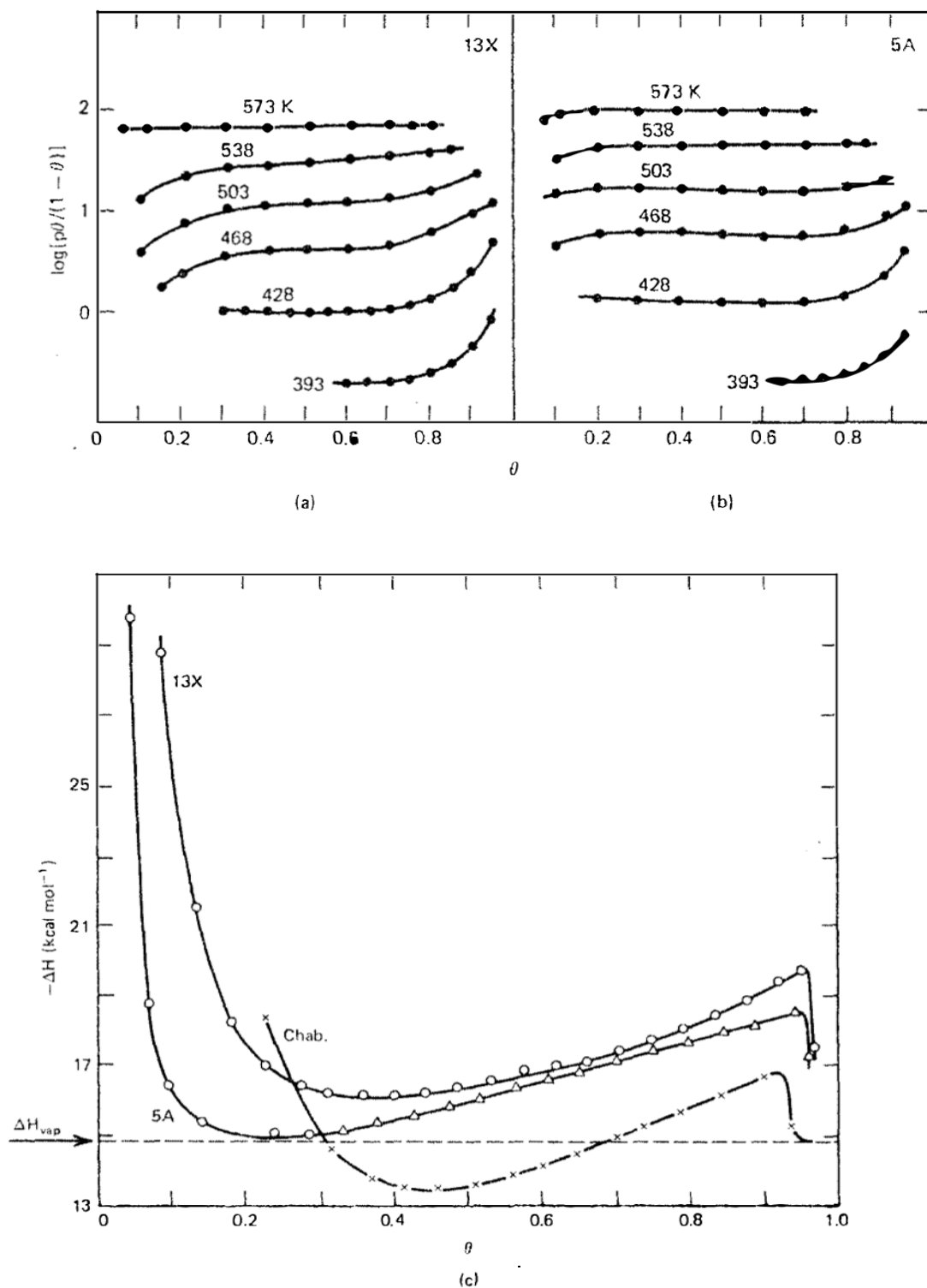


Рисунок 2.5. Константи Ленгмюра [(а) та (б)] та нагрівання адсорбції (с), нанесені на фракційне покриття (θ) для I_2 на цеолітах 5А та 13Х. Показані також дані адсорбції для I_2 на чабазиті, а також про теплоту конденсації молекулярного йоду ($-\Delta H$). [11]

Було зареєстровано приблизну відповідність для цих систем з ізотермою Ленгмюра, хоча, оскільки ґратки цеоліту 5А більші, ніж содаліту, припущення про відсутність взаємодії молекул у сусідніх клітинах може бути не достатньо повною, як і для рідкісних газів в содаліті. Однак, системи, які точно відповідають

моделі Ленгмюра, є рідкісними; для більшості систем основні припущення моделі Ленгмюра не виконуються, а ізотерми рівноваги відхиляються більшою чи меншою мірою від форми Ленгмюра. У розділі 2.3 показано, що вираз того ж загального вигляду, що і ізотерма Ленгмюра [рівн. (2.38)] отримують як наближення для ідеальної мобільної адсорбції при низьких концентраціях адсорбату. Як результат, не завжди виявляється, що рівноважна ізотерма підкоряється ленгмюровській моделі при низьких концентраціях, де відхилення стають серйозними, коли наближається до точки насиченості. Приклад такої поведінки наведено на рисунку 2.4, де показана Ленгмюрова константа $b = \frac{\Theta}{(1 - \Theta)p}$ для Kr і Xe в цеоліті 5A, нанесені на криву концентрації адсорбату. [3]

Дані Баррера та Василевського [4] щодо сорбції I₂ на цеолітах 5A та I3X (рис. 2.5) є визначальними, оскільки вони свідчать про відповідність простої моделі Ленгмюра для дуже широкого діапазону концентрації. Більш детальний аналіз показує, що теплота сорбції сильно змінюється з концентрацією сорбату, як це видно з рис. 2.5.

Постійна теплота адсорбції є однією з вимог моделі Ленгмюра, тому варіація теплоти адсорбції з покриттям означає, що в цій системі фактично не дотримуються основні постулати ленгмюровської теорії. Постійність констант Ленгмюра, очевидно, впливає з майже точної компенсації між варіацією теплової ентропії та теплою сорбції з ростом навантаження.

2.5.1.2. Відхилення від ідеальної моделі Ленгмюра

У системах, про які йшлося раніше, ідеальна модель Ленгмюра дає відповідне представлення поведінки системи при низькій концентрації, але розпадається в області насичення, де ефекти молекулярної взаємодії стають вираженими. Проте, навіть при низьких концентраціях сорбату, не всі системи відповідають моделі Ленгмюра. Відхилення можуть бути пов'язані з неоднорідністю ділянок або взаємодією між адсорбованими молекулами. Зразок поведінки, який спостерігався для кількох систем, наведено на рис. 2.6. [5]. У області з низькою концентрацією "константа" Ленгмюра знижується експоненціально з навантаженням, а потім падає швидше, коли наближається точка насиченості. Таку поведінку можна пояснити кількома різними моделями.

В якості відхилення від моделі Ленгмюра можна вважати ідеальну адсорбцію на безлічі локалізованих ділянок з слабкою взаємодією між адсорбованими молекулами на сусідніх ділянках. Така модель теоретично досліджена Лахером ⁽⁶⁾, Фаулером та Гутгенхаймом. Якщо взаємодія є досить слабкою, та випадковий розподіл адсорбованих молекул суттєво не впливає, то результуючий вираз для ізотерми є:

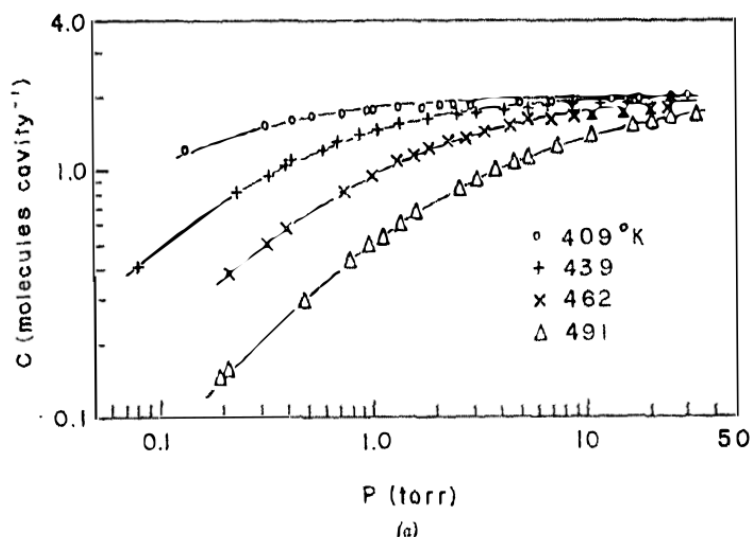
$$\frac{\Theta}{\rho(1-\Theta)} = b \exp\left(\frac{-2w\Theta}{RT}\right), \quad (2.106)$$

де $2w$ - енергія взаємодії пари (негативна для притягання, позитивна для відштовхування). Для $w \rightarrow 0$ рівн. (2.106) повертається до виразу Ленгмюра. Така ж форма рівняння може бути отримана з моделі визначення свободи за умови прийняття регулярної поведінки адсорбованої фази. Згідно з цією моделлю розвиток $\log\left[\frac{\Theta}{\rho(1-\Theta)}\right]$ проти дії концентрації сорбату повинен бути лінійним з спадом, пропорційним до w . У районі низької концентрації дані рис. 3.3 відповідають цій поведінці, даючи $w \sim 200-500$ кал / моль. Це набагато менше, ніж теплота адсорбції ($-\Delta H \sim 18$ ккал / моль) і відповідає малій відштовхувальній взаємодії між адсорбованими молекулами.

Адсорбція на множині незалежних пар ідентичних ділянок з енергією взаємодії $2w$, коли обидві ділянки пари замкнені, утворює рівняння (2.86), яка, виражена в термінах константи Генрі:

$$q = 2\Theta = \frac{K'p + \frac{1}{2}(K'p)^2 e^{-2w/RT}}{1 + K'p + \frac{1}{4}(K'p)^2 e^{-2w/RT}}, \quad (2.107)$$

коли адсорбція на безлічі незалежних пар нееквівалентних ділянок з відсутньою взаємодією між адсорбованими молекулами дає суму двох виразів Ленгмюра.



2.5.2. Мобільна адсорбція

2.5.2.1 Проста статична модель ізотерми

Для цеолітних адсорбентів використання припущення спрощеної статистичної моделі [формула (2.101) або (2.104)] є більш доцільним, ніж

припущення моделі Ленгмюра, принаймні, для неполярних сорбатів, які демонструють значну кількість внутрішньоклітинної рухливості. Для таких систем, як CH_4 -4A, наприклад, результати експериментів з розсіювання нейтронів чітко показують, що відповідно до припущень статистичної моделі, молекула має практично повну свободу переходу в межах цеолітної порожнини, при цьому переходи до сусідніх клітин зустрічаються досить рідко. Показано, що рівняння (2.101) забезпечує гарну кореляцію експериментальних ізотерм для декількох цеолітичних систем ⁽⁹⁻⁵⁾, репрезентативні приклади показані на рис. 3.4. Модель містить два параметри; константу Генрі і співвідношення β/μ (ефективний молекулярний об'єм / об'єм клітини). Обсяг цеолітової клітини відомий за структурною інформацією під час спільного обсягу Ван дер Ваальса (b) забезпечує гарне першочергове наближення до 3, тому це дійсно єдина параметрична модель.

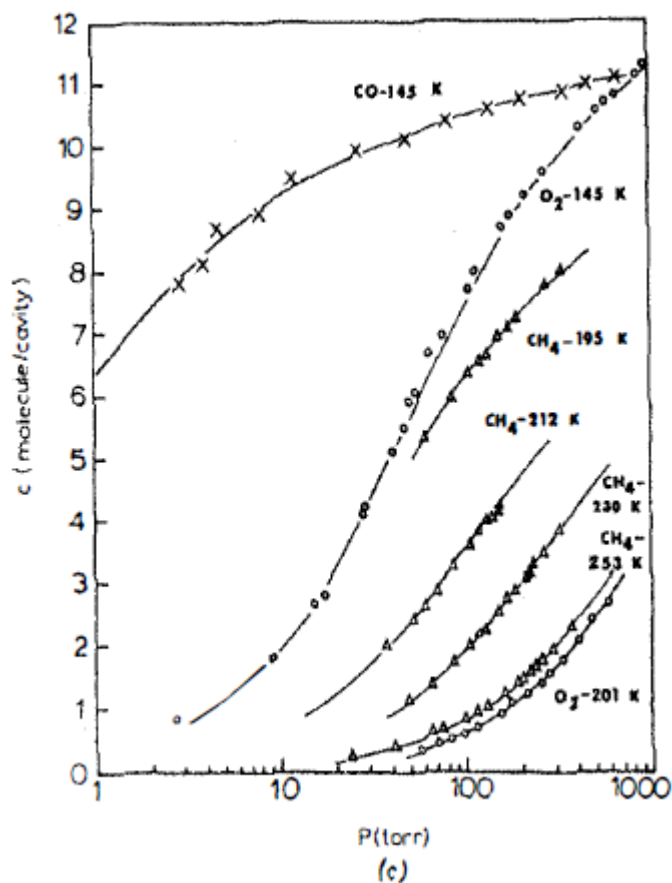


Рисунок 2.8. Однокомпонентні ізотерми для (а) C_3H_8 -5A; (б) Ni-SA (O) та N_2 -4A (e); та (с) Or5A (0), C0-5A (X) та CH_4 -5A, показують порівняння між модельними кривими та експериментальними даними. Параметри наведені в таблиці 2.1. [12, 28]

Проте придатність експериментальної ізотерми загалом може бути покращена шляхом обробки β як додаткового параметра.

Таблиця 2.1. Розраховані закони Генріха та молекулярні об'єми від однокомпонентної ізотерми

| Система | T (° K) | K' (молекул/ об'єм. тиск) | ν / β | $\beta(A^3)$ |
|---------------|-------------|--------------------------------------|---------------|--------------|
| $N_2 - 5A$ | $T_c = 126$ | | | $b = 65$ |
| | 145 | 3.7 | 13.5 | 57.5 |
| | 195 | 0.11 | 12 | 65 |
| | 205.5 | 0.062 | 10 | |
| | 218 | 0.034 | 10 | |
| | 232 | 0.015 | 10 | |
| | 252 | 0.007 | 10 | 77 |
| | 255 | 0.008 | 10 | |
| | 273 | 0.0037 | 10 | |
| | 298 | 0.0016 | 10 | |
| $N_2 - 4A$ | 195 | 0.1 | 11 | 70 |
| | 235 | 0.0063 | 10 | 77 |
| | 273 | 0.0024 | 10 | 77 |
| $O_2 - 5A$ | $T_c = 155$ | | | $b = 53$ |
| | 145 | 0.31 | 17 | 46 |
| | 201 | 0.007 | 17 | 46 |
| | 298 | 0.00041 | 15 | 52 |
| $CO - 5A$ | $T_c = 133$ | | | $b = 66$ |
| | 145 | 50 | 13 | 59 |
| | 298 | 0.011 | 8 | 97 |
| $CH_4 - 5A$ | $T_c = 191$ | | | $b = 71$ |
| | 190 | 0.33 | 13.5 | 57.5 |
| | 212 | 0.083 | 12 | 64.5 |
| | 230 | 0.033 | 12 | 64.5 |
| | 253 | 0.011 | 12 | 64.5 |
| | 273 | 0.007 | 10 | 77 |
| $C_3H_8 - 5A$ | $T_c = 370$ | | | $b = 140$ |
| | 358 | 0.14 | 5 | 140 |

Отримані значення мають такий самий порядок, як Ван-Дер-Ваальсові, але, як правило, показують невелике збільшення з зміною температури, як показано в таблиці 4.1. В оригінальному варіанті цієї моделі було включено важливий термін на основі потенційних констант Ленарда Джонса, щоб визначити міжмолекулярне

притягання між адсорбованими молекулами. Проте було встановлено, що придатність експериментальної ізотерми не була істотно покращена шляхом включення цих факторів [10] тому вони були опущені в подальших дослідженнях. Це спостереження припускає, що, принаймні для неполярних сорбатів, адсорбційна рівновага поведінки регулюється потенціалом притягання системи, що визначає константу Генріха, і відштовхувальна взаємодія між молекулами через їх кінцевий розмір. Привабливі сили між адсорбованими молекулами мають лише другорядне значення. З неполярними сорбатами зазвичай спостерігається збільшення теплоти адсорбції з покриттям, як це показано на рис. 3.5, і це зазвичай пояснюється впливом міжмолекулярних сил притягання. Однак ізотерма статистичної моделі пропонує альтернативне пояснення.

Об'єм порожнини цеоліту = 776 \AA^3 . Концентрація сорбату 1 молекули / порожнини еквівалентна 0.45 ммоль/г або 0,56 ммоль/г кристалів безводного цеоліту.

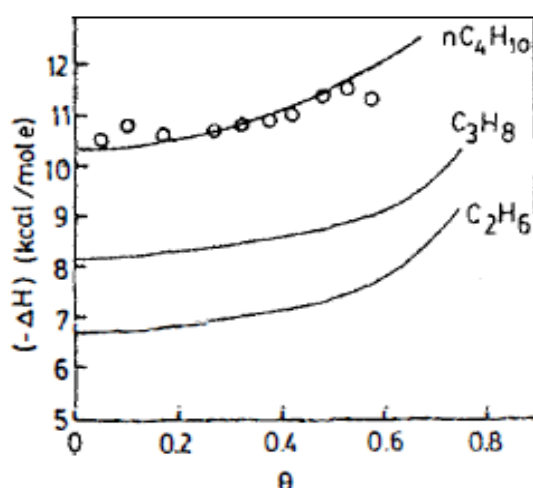


Рисунок 2.9. Варіація ізотермічного нагрівання сорбції з покриттям, розраховане з рівняння. (2.101), для легких парафінів у цеоліті 5A. Точки є експериментальними даними Шірмера, [2] для Бутану-5A. [10]

Якщо ефективний молекулярний об'єм збільшується з температурою, як це зазвичай відбувається, то ізотермічні нагрівання сорбції розраховуються за моделлю [формула. (2.101)] без сили притягання - збільшення з навантаженням, подібним до того, що спостерігається експериментально [10]. Розрахункові значення для бутану показані на рис. 2.9. Згідно з моделлю, ця ізотермічна варіація виникає тому, що, оскільки молекула сорбату розширює розподіл молекул між клітинами, знижуючи середній рівень використання за певного тиску. Для підтримки постійної адсорбованої фазової концентрації тиск повинен бути збільшений, щоб компенсувати втрати, а це означає збільшення ізотермічної

теплоти. Ізотермічні нагрівання, розраховані при постійній об'ємній частці, не залежать від площі поверхні.

Основні припущення цієї моделі можна розглядати як обґрунтоване наближення для неполярних сорбатів при скромних концентраціях. Не варто очікувати застосування моделі в регіоні високої концентрації, що наближається до межі насичення, або для високополярних сорбатів, таких як NH_3 або ж H_2O які майже повністю локалізовані. Проте модель, як виявилось, забезпечує адекватне уявлення про поведінку досить сильно квадрупольних сорбатів, таких як CO_2 на декількох цеолітах [13-16]. При низьких температурах можна очікувати, що адсорбція стає більш локалізованою, що призведе до відхилень від моделі.

Застосування рівняння (2.104) до співвідношення експериментальних даних рівноваги для бензолу на цеоліті 13X [16] ілюструється на рис. 2.10. Це рівняння є більш раннім і застосовується менш широко, ніж рівняння. (2.101).

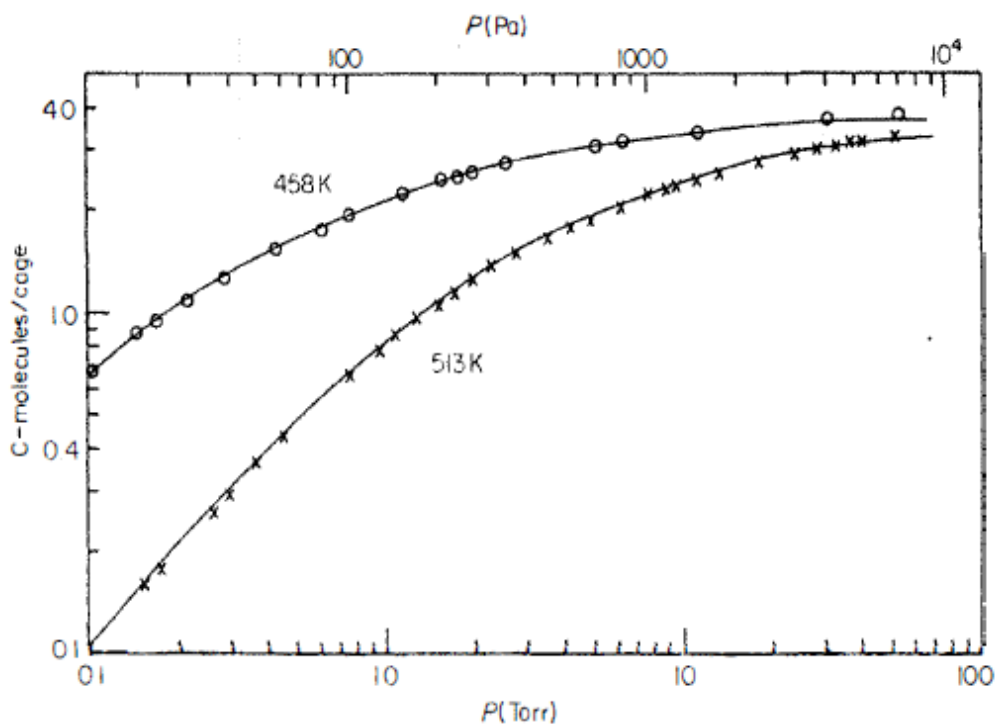


Рисунок 2.10. Експериментальні ізотерми для бензолу в кристалах цеоліту 13X при 458 та 513 К. Експериментальні точки, криві розраховуються з рівняння. (2.104) з $\nu/\beta = 5.0$, $K' = 8.8$ молекули / одиницю тиску на 458 К, та $K' = 1.25$ молекули / одиницю тиску при 513 К. [16]

Однак, крім випадків, коли межа насичення менше клітини становить приблизно чотири молекули, обидва вирази схожі, за винятком невеликої різниці в чисельному значенні константи Генрі, тому можна сподіватися, що застосування рівняння (2.104) приведе до результатів, які по суті такі ж, як ті, що отримані з рівняння (2.101).

2.5.3. Загальна статистична кореляція

Оскільки припущення, з яких рівняння (2.101) та (2.104) виведені, не можуть бути більш ніж грубими наближеннями, які, як очікується, можуть руйнуватися при високих концентраціях сорбату, альтернативний підхід, заснований на рівнянні (2.105) було застосовано для кореляції та аналізу рівноважних даних для сильно адсорбованих видів, таких як ксилоли на цеолітах X і Y. За інтеграцією рівняння Гіббса можна розрахувати тиск розповсюдження (або поверхневий потенціал Φ) як функція рівноважного тиску пари або концентрації сорбату, безпосередньо з експериментальної ізотерми [рівн. (2.50)]. З рівнянь (2.90), (2.94) і (2.99) випливає:

$$\frac{\Phi}{RT} = \ln \xi = \int_0^{p^o} q^o(p) \frac{dp}{p} = l \left\{ 1 + K' p^o + \frac{A_2 (K' p^o)^2}{2!} + \frac{A_3 (K' p^o)^3}{3!} + \dots \right\}, \quad (2.108)$$

де q виражається як кількість молекул на пору. Знаючи константу Генрі, яке виявляється з початкового нахилу ізотерми, можна визначити значення коефіцієнтів A_2, A_3, \dots , з похідної найменших квадратів. Звичайно, продовжувати можна безпосередньо шляхом підбору експериментальної ізотерми до рівняння. (2.105), але така процедура на практиці виявляється менш задовільною через компенсацію між різними показниками в чисельнику та знаменнику.

Таблиця 4.2. Співвідношення рівноважних ізотермів вуглеводнів на цеоліті NaX та NaY відповідно до рівнянь. (2.105)

| Сорбент | Сорбат | T (K) | $K \left(\frac{\text{Molecule}}{\text{Caetorr}} \right)$ | A_2 | A_3 | $KA \frac{1/3}{3}$ |
|---------|--------------|-------|---|-------|-------|--------------------|
| NaX | cyclohexane | 439 | 0.38 | 0.99 | 1.45 | - |
| NaX | toluene | 513 | 4.95 | 0.81 | 0.001 | - |
| NaY | o-xylene | 477 | 8.7 | 1.04 | 1.01 | 7.8 |
| NaY | m-xylene | 477 | 5.9 | 0.98 | 2.3 | 7.8 |
| NaY | p-xylene | 477 | 5.7 | 1.16 | 4.8 | 9.6 |
| NaY | ethylbenzene | 477 | 15.9 | 0.97 | 0.007 | 3.04 |

Послідовність спорідності (C8 аорнатика -NaY):

Низька концентрація (K): EB > OX > MX ~ PX

Висока концентрація ($KA \frac{1/3}{3}$): PX > OX > MX > EB

Результати експериментального дослідження [17] сорбції декількох вуглеводнів на NaX та NaY цеолітів узагальнені у табл. 3.2 та рис. 3.7. Для цих видів при всіх досліджуваних температурах вміст насичення виявився близьким

до 3.0 молекули / пору тому тільки два коефіцієнти (A_2 і A_3) потрібні в рівнянні (3.5). Константи Генрі були знайдені з граничних схилів ізотерми при низькому тиску. Значення ξ тоді були розраховані шляхом інтегрування ізотерм [Формула (3.5)], і отримані значення були узгоджені з теоретичним виразом:

$$\xi = 1 + K'p + \frac{A_2}{2}(K'p)^2 + \frac{A_3}{6}(K'p)^3, \quad (2.109)$$

для визначення констант A_2 і A_3 . Відповідність експериментальних даних до рівняння (3.6) показано на малюнку 4.7, в якому функція $(\xi - 1 - K'p)/(K'p)^2$ нарисована проти $K'p$. Значення A_2 , отримані з перехоплень таких ділянок, були у всіх випадках дуже близькі, що свідчить про те, що до тих пір, поки в порі містяться менш ніж 2,0 молекули сорбату, дуже мало сполук сорбату-сорбату. Значення A_3 , однак, коливаються від 0,007 для етилбензолу до приблизно 5 для параксилолу, тобто коли три молекули присутні в тій же порі, існують значні взаємодії, що може призвести до чистого відштовхування чи чистого притягання залежно від сорбату.

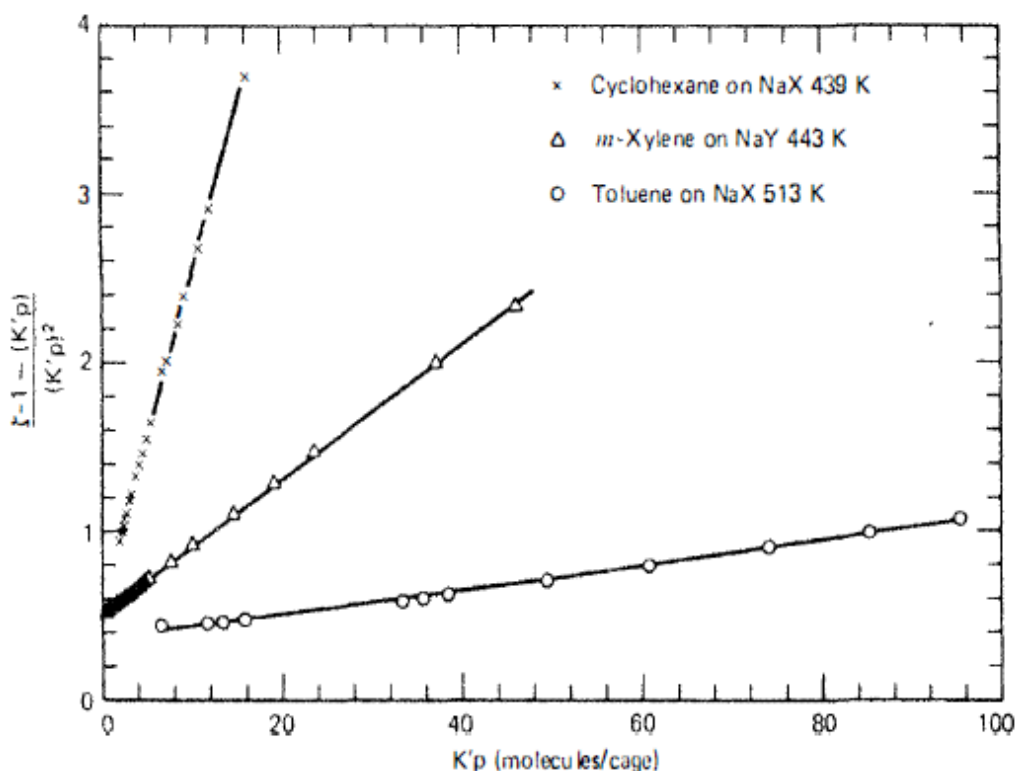


Рисунок 2.11. Експериментальні дані рівноваги для вуглеводнів в цеоліті NaX та Na Y, що показують відповідність ізотерм у відповідності з формулою (2.10)

Якщо в змішаній адсорбованій фазі немає суттєвих неідеальних взаємодій, то порівняння рівноважного тиску для двох чистих сорбатів при однаковій

температурі та розподіленому тиску (або такому ж значенні ξ) забезпечує оцінка коефіцієнта розділення.

При низьких концентраціях вона просто зводиться до співвідношення констант Генрі, а при високій концентрації сорбату, що наближається до насичення, коефіцієнт розділення залежить також від коефіцієнтів третього порядку A_{31} і A_{32} :

$$q \rightarrow 0 \quad a_0 = \frac{K'_1}{K'_2} \quad (2.110)$$

$$q \rightarrow q_s \quad a_{12} = \frac{K'_1}{K'_2} \left(\frac{A_{31}}{A_{32}} \right)^{1/3} = a_0 \left(\frac{A_{31}}{A_{32}} \right)^{1/3}$$

Коефіцієнт поділу при високій концентрації (як у системі рідкої фази), таким чином, може не мати відношення до коефіцієнта роздільної здатності при низькій концентрації, що визначається з співвідношенням констант Генрі. Порівнюючи значення K та $KA^{1/3}$, можна побачити, що для ароматичних систем С8, розглянутих тут, при низьких концентраціях етилбензол є найбільш сильно адсорбованим видом, а *p*-ксилол витримується менш сильно, тоді як при високих концентраціях відносна спорідненість до цих видів змінюється. Виявляється, що при високих навантаженнях орбат-орбітальні міжмолекулярні взаємодії є принаймні такими ж важливими, як адсорбати-орбентні взаємодії при визначенні селективності.

Список джерел до розділу 2

1. T. L. Hill, *J. Chem. Phys.* 17, 507 and 520, 1949.
2. T. L. Hill, *Advances in Catalysis* 4, 211, 1952.
3. T. L. Hill, *J. Chem. Phys.* 18, 246, 1950.
4. T. L. Hill, *Introduction to Statistical Thermodynamics*. Widison-Weslty, Reading, Mass., 1960.
5. D. H. Everett, *Trans. Faraday Soc.* 46, 453, 942, and 957 (1950).
6. D. M. Young and A. D. Crowell, *Physical Adsorption of Gases*. Butterworths, London, 1962.
7. J. W. Gibbs, *Collected Works*. Yale University Press. New Haven. Conn., 1928.
8. J. H. DeBoer, *The Dynamical Character of Adsorption*, 2nd ed. Oxford Press, London, 1968.
9. R. M. Barrer and J. A. Davies, *Proc. Roy. Soc. London* A320, 289, 1970.
10. A. P. Vavlitis, D. M. Ruthven, and K. F. Loughlin, *J. Colloid Interface Sci.* 84, 526, 1981.
11. A. L. Myers and J.M. Prausnitz, *AIChE J* 11, 121, 1965.
12. D. B. Broughton, *Ind. Eng. Chem.* 40, 1506, 1948.
13. S. Suwanayuen and R. P. Danner, *A/ChE J* 26, 68 and 76 1980.
14. R. H. Fowler and E. A. Guggenheim, *Statistical Thermodynamics*. Cambridge University Press, Cambridge, 1939.
15. G. M. Wilson, *J. Am. Chem. Soc.* 88, 127, 1964.
16. J. M. Prausnitz, *Molecular Thermodynamics of Fluid Phase Equilibria*. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1969.

17. L. Riekert, *Adv. Catalysis* 21, 287, 1970.
18. V. A. Bakaev, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* 167, 369, 1967.
19. P. Brauer, A. A. Lopatkin, and G. Ph. Stepanez, *Adv. Chem.* 102, 97, 1971.
20. D. M. Ruthven, *Nature Phys. Sci.* 232(29), 70, 1971.
21. D. M. Ruthven and K. F. Loughlin, *J. Chem. Soc. Faraday Trans. I* 68, 696, 1972.
22. D. M. Ruthven, *AIChE JI* 22, 753, 1976.
23. D. M. Ruthven, K. F. Loughlin, and K. A. Holborow, *Chem. Eng. Sci.* 28, 701, 1973.
24. R. M. Barrer and D. E.W. Vaughan, *J. Phys. Chem. Solids* 32, 731, 1971.
25. D. M. Ruthven, *Zeolites* 2, 242, 1982.
26. M. M. Dubinin, *Chem. Revs.* 60, 235, 1960.
27. M. M. Dubinin, *Pure Appl. Chem.* 10(4), 309, 1965.
28. B. P. Bering, M. M. Dubinin, and V. V. Serpinsky, *J. Colloid Interface Sci.* 38(1), 185, 1972.
29. B. P. Bering, M. M. Dubinin, and V. V. Serpinsky, *J. Colloid Interface Sci.* 21, 378, 1966.
30. M. M. Dubinin and V. A. Astakhov, *Adv. Chem.* 102, 69, 1971.
31. M. Polanyi, *Trans. Faraday Soc.* 28, 316, 1932.
32. M. Polanyi, *Z. Elektrochem.* 35, 431, 1929.
33. L. Berenyi, *Z. Phys. Chem. Leipzig* 94, 628, 1920.
34. M. M. Dubinin, A. F. Fomkin, I. I. Seliverstova, and V. V. Serpinsky, *Proceedings of the Fifth International Conference on Zeolites, Naples, June 1980*, L. V. C. Rees (ed.). Heyden, London, 1980.
35. R. P. Danner, Engineering Foundation Conference on Fundamentals of Adsorption, Schloss Elmau, Bavaria, May 1983.

РОЗДІЛ 3

МЕТОДИ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ В ЗАДАЧАХ ДИFUЗІЙНОГО МАСОПЕРЕНОСУ ТА АДСОРБЦІЇ В ОДНОРІДНИХ І НЕОДНОРІДНИХ БАГАТОСКЛАДОВИХ НАНОПОРІСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

3.1. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для однорідних середовищ переносу

3.1.1. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для обмежених середовищ переносу

Скінченне інтегральне перетворення Фур'є на множині $I_1 = \{x: x \in [l_0, l_1], l_0 \geq 0, l_1 < \infty\}$ запроваджено й математично обґрунтовано в роботі [18]. При цьому крайові умови мають вигляд:

$$B_{jk}[u] \equiv \left[\left(\alpha_{jk} \frac{d}{dx} + \beta_{jk} \right) u \right]_{x=l_k} = g_k, |\alpha_{jk}| + |\beta_{jk}| \neq 0; j, k = 1, 2.$$

Така структура крайових операторів припускає, що на масообмінних межах середовища масообмін відбувається при постійних градієнтах, тобто задаються стаціонарні режими переносу. Для врахування швидкостей зміни градієнтів визначальних (основних) параметрів переносу і їх градієнтів при формулюванні крайових задач, що є математичними описами розглядуваного переносу в крайових умовах присутній оператор $\frac{\partial}{\partial t}$ або $\frac{\partial^2}{\partial t^2}$ (для динамічних задач). Це приводить до появи спектрального параметра в крайових умовах відповідної спектральної задачі Штурма-Ліувілля.

Скінченне інтегральне перетворення Фур'є побудуємо з використанням ядра Коші - фундаментального розв'язку задачі Коші для рівняння масопереносу при однорідній крайовій умові. Розглянемо крайову задачу побудови обмеженого в області $D = \{(t, x): t \in (0, \infty), x \in (l_0, l_1), l_0 \geq 0, l_1 < \infty\}$ розв'язку рівняння переносу параболічного типу [4]

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, a > 0, \gamma^2 \geq 0 \quad (3.1)$$

за початковою умовою

$$u(t, x)|_{t=0} = g(x) \quad (3.2)$$

та крайовими умовами

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u \Big|_{x=l_0} = 0$$

$$\left[\left(\alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right] u \Big|_{x=l_1} = 0 \quad (3.3)$$

$$\beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0 \neq 0, \alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1 \neq 0, \left(|\alpha_{11}^0| + |\beta_{11}^0| \neq 0, |\alpha_{11}^1| + |\beta_{11}^1| \neq 0, \delta_{11}^m \geq 0, \gamma_{11}^m \geq 0, m=0,1 \right).$$

В припущенні, що функція $u(t, x)$ є оригіналом за Лапласом щодо аргумента t [15]. У зображенні за Лапласом

$$L[u] = \int_0^\infty u(t, x) e^{-pt} dt \equiv u^*(p, x) \quad (3.4)$$

отримуємо задачу побудови на сегменті $[l_0, l_1]$ розв'язку неоднорідного модифікованого диференціального рівняння Фур'є

$$\frac{d^2 u^*}{dx^2} - q^2 u^* = -\bar{g}(x); \bar{g} = a^{-2} g, q^2 = a^{-2} (p + \gamma^2), \gamma^2 \geq 0 \quad (3.5)$$

за крайовими умовами

$$\left(\alpha_{11}^0 \frac{d}{dx} + \bar{\beta}_{11}^0 \right) u^* \Big|_{x=l_0} = \phi_1^0(l_0), \left(\alpha_{11}^1 \frac{d}{dx} + \bar{\beta}_{11}^1 \right) u^* \Big|_{x=l_1} = \phi_1^1(l_1). \quad (3.6)$$

Тут

$$\bar{\alpha}_{11}^m = \alpha_{11}^m + \delta_{11}^m p, \bar{\beta}_{11}^m = \beta_{11}^m + \gamma_{11}^m p; \phi_1^0(l_0) = \delta_{11}^0 g'(l_0) + \gamma_{11}^0 g(l_0), \phi_1^1(l_1) = \delta_{11}^1 g'(l_1) + \gamma_{11}^1 g(l_1).$$

Вважаємо, що $\phi_1^0(l_0) = 0, \phi_1^1(l_1) = 0$. У протилежному випадку покладемо $g(x) = \varphi(x) + ax + b$ й обчислимо коефіцієнти a, b із алгебраїчної системи:

$$\begin{cases} (\delta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 l_0) a + \gamma_{11}^0 b = \phi_1^0 \\ (\delta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 l_1) a + \gamma_{11}^1 b = \phi_1^1 \end{cases}$$

Звідси випливає, що при $\delta_0 \equiv \delta_{11}^0 \gamma_{11}^1 - \delta_{11}^1 \gamma_{11}^0 - \gamma_{11}^0 \gamma_{11}^1 (l_1 - l_0) \neq 0$,

$$a = (\phi_1^0 \gamma_{11}^1 - \phi_1^1 \gamma_{11}^0) \delta_0^{-1}, b = [(\delta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 l_0) \phi_1^1 - (\delta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 l_1) \phi_1^0] \delta_0^{-1}.$$

У результаті одержуємо функцію

$$\varphi(x) = g(x) + \frac{\gamma_{11}^0 \phi_1^1 - \gamma_{11}^1 \phi_1^0}{\delta_0} x + \frac{(\delta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 l_1) \phi_1^0 - (\delta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 l_0) \phi_1^1}{\delta_0},$$

для якої виконуються рівності $[\delta_{11}^0 \varphi'(x) + \gamma_{11}^0 \varphi(x)]_{x=l_0} = 0, [\delta_{11}^1 \varphi'(x) + \gamma_{11}^1 \varphi(x)]_{x=l_1} = 0$.

Фундаментальну систему розв'язків для відповідного (3.5) однорідного рівняння утворюють функції $ch qx$ та $sh qx$ [29]. Визначимо функції:

$$V_{jk}^{m1}(ql_m) \equiv \left(\alpha_{jk}^m \frac{d}{dx} + \bar{\beta}_{jk}^m \right) ch qx \Big|_{x=l_m} = \alpha_{jk}^m q sh ql_m + \bar{\beta}_{jk}^m ch ql_m,$$

$$V_{jk}^{m2}(ql_m) \equiv \left(\alpha_{jk}^m \frac{d}{dx} + \bar{\beta}_{jk}^m \right) sh qx \Big|_{x=l_m} = \alpha_{jk}^m q ch ql_m + \bar{\beta}_{jk}^m sh ql_m,$$

$$\Phi_{jk}^m(q l_m, qx) = V_{jk}^{m2}(q l_m) \operatorname{ch} q_m x - V_{jk}^{m1}(q l_m) \operatorname{sh} q_m x.$$

Згідно [29] загальний розв'язок крайової задачі (3.5)-(3.7) має структуру

$$u^*(p, x) = \int_{l_0}^l \mathcal{H}^*(p, x, \xi) \tilde{g}(\xi) d\xi \quad (3.8)$$

Тут $\mathcal{H}^*(p, x, \xi)$ фундаментальна функція (функція Коші) крайової задачі (3.5)-(3.7), що володіє такими властивостями [29]:

$$\begin{aligned} 1) \text{ при } x \neq \xi: & \left(\frac{d^2}{dx^2} - q^2 \right) \mathcal{H}^*(p, \xi, \xi) \equiv 0; \\ 2) \text{ при } x = \xi: & \\ \text{а) } & \mathcal{H}^*(p, x, \xi) \Big|_{x=\xi+0} - \mathcal{H}^*(p, x, \xi) \Big|_{x=\xi-0} = 0 \end{aligned} \quad (3.9)$$

$$\text{б) } \frac{d}{dx} \mathcal{H}^*(p, x, \xi) \Big|_{x=\xi+0} - \frac{d}{dx} \mathcal{H}^*(p, x, \xi) \Big|_{x=\xi-0} = -1$$

$$3) \left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) \mathcal{H}^*(p, x, \xi) \Big|_{x=l_0} = 0; \left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) \mathcal{H}^*(p, x, \xi) \Big|_{x=l_1} = 0. \quad (3.10)$$

Якщо, використовуючи фундаментальну систему розв'язків, покласти

$$\mathcal{H}^*(p, x, \xi) = \begin{cases} \mathcal{H}^{*-}(p, x, \xi) \equiv A_1 \operatorname{ch} qx + B_1 \operatorname{sh} qx, & l_0 < x < \xi < l_1 \\ \mathcal{H}^{*+}(p, x, \xi) \equiv A_2 \operatorname{ch} qx + B_2 \operatorname{sh} qx, & l_0 < \xi < x < l_1 \end{cases}, \quad (3.11)$$

то умови (3.9), (3.10) для визначення A_j та B_j дають алгебраїчну систему з чотирьох рівнянь:

$$\begin{aligned} (A_2 - A_1) \operatorname{ch} q\xi + (B_2 - B_1) \operatorname{sh} q\xi &= 0 \\ (A_2 - A_1) \operatorname{sh} q\xi + (B_2 - B_1) \operatorname{ch} q\xi &= -q^{-1} \\ A_1 V_{11}^{01}(ql_0) + B_1 V_{11}^{02}(ql_0) &= 0 \\ A_2 V_{11}^{11}(ql_1) + B_2 V_{11}^{12}(ql_1) &= 0 \end{aligned} \quad (3.12)$$

З перших двох рівнянь системи (3.12) знаходимо співвідношення:

$$A_2 - A_1 = q^{-1} \operatorname{sh} q\xi, \quad B_2 - B_1 = -q^{-1} \operatorname{ch} q\xi.$$

Поклавши одержані співвідношення для A_2, B_2 в третє та четверте рівняння системи (3.12), отримаємо систему для визначення A_1 та B_1

$$\begin{cases} A_1 V_{11}^{01}(ql_0) + B_1 V_{11}^{02}(ql_0) = 0 \\ A_1 V_{11}^{11}(ql_1) + B_1 V_{11}^{12}(ql_1) = q^{-1} \Phi_{11}^1(ql_1, q\xi) \end{cases} \quad (3.13)$$

Припустимо, що виконана умова однозначної розв'язності крайової задачі: визначник алгебраїчної системи (3.13)

$$\Delta^*(p) \equiv V_{11}^{01}(ql_0) V_{11}^{12}(ql_1) - V_{11}^{02}(ql_0) V_{11}^{11}(ql_1) \neq 0 \quad (3.14)$$

для $p = \sigma + i\tau$ з $\operatorname{Re} p = \sigma \geq \sigma_0$, де σ_0 – абсциса збіжності інтеграла Лапласа, та $\operatorname{Im} p = \tau \in (-\infty, +\infty)$.

При виконанні умови розв'язності (3.14) із системи (3.13) однозначно знаходимо, що $A_1 = -\frac{V_{11}^{02}(ql_0)}{q\Delta^*(p)}\Phi_{11}^1(ql_1, q\xi)$, $B_1 = \frac{V_{11}^{01}(ql_0)}{q\Delta^*(p)}\Phi_{11}^1(ql_1, q\xi)$.

Цим функція Коші визначена й внаслідок симетрії відносно діагоналі $x = \xi$ має структуру:

$$\mathcal{H}^*(p, x, \xi) = -\frac{1}{q\Delta^*(p)} \begin{cases} \Phi_{11}^0(ql_0, qx)\Phi_{11}^1(ql_1, q\xi), & l_0 < x < \xi < l_1 \\ \Phi_{11}^0(ql_0, q\xi)\Phi_{11}^1(ql_1, qx), & l_0 < \xi < x < l_1 \end{cases} \quad (3.15)$$

Повертаючись в формулі (3.8) до оригіналу, маємо розв'язок задачі (3.1)-(3.3):

$$u(t, x) = \int_{l_0}^{l_1} \mathcal{H}(t, x, \xi) g(\xi) \sigma d\xi, \quad \sigma = a^{-2} \quad (3.16)$$

Тут за означенням [2]

$$\mathcal{H}(t, x, \xi) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \mathcal{H}^*(p, x, \xi) e^{pt} dp \quad (3.17)$$

Обчислимо коректний для досліджень вираз інтегралу (3.17).

Покладемо $\sqrt{p + \gamma^2} = i\beta$, тобто $p = -(\beta^2 + \gamma^2)$. Тоді одержуємо, що

$$\begin{aligned} q &= ia^{-1}\beta \equiv i\bar{\beta}, \quad \operatorname{ch} qx = \cos \bar{\beta}x, \quad \operatorname{sh} qx = i \sin \bar{\beta}x, \\ V_{jk}^{m1}(i\bar{\beta}l_m) &= -\alpha_{jk}^m \bar{\beta} \sin \bar{\beta}l_m + \bar{\beta}_{jk}^m \cos \bar{\beta}l_m \equiv \sigma_{jk}^{m1}(\beta), \\ V_{jk}^{m2}(i\bar{\beta}l_m) &= i[\alpha_{jk}^m \bar{\beta} \cos \bar{\beta}l_m + \bar{\beta}_{jk}^m \sin \bar{\beta}l_m \equiv i\sigma_{jk}^{m2}(\beta)], \\ \Delta^*(p) \Big|_{p=-(\beta^2+\gamma^2)} &\equiv i\bar{\delta}(\beta) = i[\sigma_{11}^{01}(\beta)\sigma_{11}^{12}(\beta) - \sigma_{11}^{02}(\beta)\sigma_{11}^{11}(\beta)], \\ \bar{\alpha}_{jk}^m &= \alpha_{jk}^m - \delta_{jk}^m(\beta^2 + \gamma^2), \quad \bar{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_{jk}^m(\beta^2 + \gamma^2), \quad m = 0, 1. \end{aligned}$$

Розглянемо трансцендентне рівняння

$$\tilde{\delta}(\beta) \equiv \tilde{\sigma}_{11}^{01}(\beta)\tilde{\sigma}_{11}^{12}(\beta) - \tilde{\sigma}_{11}^{02}(\beta)\tilde{\sigma}_{11}^{11}(\beta) = 0. \quad (3.18)$$

Теорема 3.1.1. (про дискретний спектр): корені β_m трансцендентного рівняння (3.18) утворюють дискретний спектр: корені різні, дійсні, симетричні відносно $\beta = 0$ на піввісі $\beta > 0$, утворюють монотонно зростаючу числову послідовність з єдиною граничною точкою $\beta = +\infty$.

Доведення: При $\delta_{11}^0 = 0, \gamma_{11}^0 = 0, \delta_{11}^1 = 0, \gamma_{11}^1 = 0$ корені β_m трансцендентного рівняння (3.20) утворюють дискретний спектр [6]: корені різні, дійсні, симетричні відносно $\beta = 0$ на піввісі $\beta > 0$, утворюють монотонно зростаючу числову послідовність з єдиною граничною точкою $\beta = +\infty$. Повторюючи міркування [18],

приходимо до висновку, що корені β_m трансцендентного рівняння (3.18) утворюють дискретний спектр.

Оскільки для функції $\mathcal{H}^*(p, x, \xi)$ точки $p_n = -(\beta_n^2 + \gamma^2)$ є простими полюсами, то за узагальненою теоремою розвинення [15] отримуємо, що

$$\mathcal{H}^*(p, x, \xi) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\beta_n^2 + \gamma^2)t} \frac{V_0(x, \beta_n) V_0(\xi, \beta_n)}{\|V_0(x, \beta_n)\|^2}. \quad (3.19)$$

У формулі (3.19) бере участь спектральна функція

$$V_0(x, \beta_n) = \tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n) \sin \frac{x}{a} \beta_n - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) \cos \frac{x}{a} \beta_n \equiv \tilde{\beta}_{11}^0 \sin \bar{\beta}_n(x - l_0) - \tilde{\alpha}_{11}^0 \bar{\beta}_n \cos \bar{\beta}_n(x - l_0), \quad (3.20)$$

квадрат норми якої

$$\begin{aligned} \|V_0(x, \beta_n)\|_1^2 &= -\tilde{\beta}_n \frac{\tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{12}(\beta_n)} \left[\left(\frac{1}{i} \frac{d}{dp} \Delta^*(p) \right) \Big|_{p=p_n} \right] \equiv \\ &\int_{l_0}^{l_1} [V_0(x, \beta_n)]^2 \sigma dx + \frac{\alpha^{-2}}{\beta_{11}^0 \delta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0} \left(\delta_{11}^0 V_0'(l_0, \beta_n) + \gamma_{11}^0 V_0(l_0, \beta_n) \right)^2 + \frac{a^{-2}}{\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1} \left(\delta_{11}^1 V_0'(l_1, \beta_n) + \gamma_{11}^1 V_0(l_1, \beta_n) \right)^2 \end{aligned} \quad (3.21)$$

Мають місце твердження.

Теорема 3.1.2. (про спектральну функцію) Функція $V_0(x, \beta_n)$, визначена формулою (3.21) є спектральною функцією задачі Штурма-Ліувілля:

$$\left(\frac{d^2}{dx^2} + a^{-2} \beta_n^2 \right) u(x, \beta_n) = 0 \quad (3.22)$$

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) u \Big|_{x=l_0} = 0, \left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) u \Big|_{x=l_1} = 0. \quad (3.23)$$

Доведення: Оскільки $\frac{d^2}{dx^2} \sin \bar{\beta}_n(x - l_0) = -\bar{\beta}_n^2 \sin \bar{\beta}_n(x - l_0)$, $\frac{d^2}{dx^2} \cos \bar{\beta}_n(x - l_0) = -\bar{\beta}_n^2 \cos \bar{\beta}_n(x - l_0)$, то

$\frac{d^2}{dx^2} V_0(x, \beta_n) = -\bar{\beta}_n^2 \cdot V_0(x, \beta_n) = -a^{-2} \beta_n^2 \cdot V_0(x, \beta_n)$, тобто рівняння (3.24) справджується.

Безпосередньо маємо

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) V_0(x, \beta_n) \Big|_{x=l_0} = \tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n) \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) \tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n) \equiv 0,$$

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) V_0(x, \beta_n) \Big|_{x=l_1} = \tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n) \tilde{v}_{11}^{12}(\beta_n) - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) \tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n) \equiv 0$$

внаслідок тотожності $\delta(\beta_n) \equiv 0$.

Тотожність $\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n) \tilde{v}_{11}^{12}(\beta_n) - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) \tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n) \equiv 0$ дозволяє спектральну функцію переписати у вигляді

$$V_0(x, \beta_n) = \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \left(\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n) \sin \bar{\beta}_n x - \tilde{v}_{11}^{02}(\beta_n) \frac{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)} \sin \bar{\beta}_n x \right) = \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \left(\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n) \sin \bar{\beta}_n x - \tilde{v}_{11}^{12}(\beta_n) \sin \bar{\beta}_n x \right) \equiv$$

$$\equiv \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \left[\tilde{\beta}_{11}^1 \sin \bar{\beta}_n (l_1 - x) - \tilde{\alpha}_{11}^1 \bar{\beta}_n \cos \bar{\beta}_n (l_1 - x) \right] \quad (3.24)$$

Із рівностей (3.20), (3.24) маємо:

$$V_0(l_0, \beta_n) = -\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)}; \quad V_0(l_1, \beta_n) = -\tilde{\alpha}_{11}^0 \bar{\beta}_n \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \equiv -\tilde{\alpha}_{11}^0 a^{-2} \beta_n \frac{\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n)}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)}.$$

На підставі трансцендентного рівняння (3.18) та рівностей (3.20), (3.24) можна отримати квадрат норми спектральної функції $V_0(l_0, \beta_n)$:

$$\|V_0(l_0, \beta_n)\|^2 = \int_{l_0}^{l_1} [V_0(l_0, \beta_n)]^2 \sigma dx = \frac{1}{2a^2} \left[\left(\frac{\tilde{\alpha}_{11}^0}{a} \beta_n \right)^2 + (\tilde{\beta}_{11}^0)^2 (l_1 - l_0) + \tilde{\alpha}_{11}^0 \tilde{\beta}_{11}^0 + \tilde{\alpha}_{11}^1 \tilde{\beta}_{11}^1 \frac{(\tilde{v}_{11}^{01}(\beta_n))^2}{\tilde{v}_{11}^{11}(\beta_n)} \right]. \quad (3.25)$$

Внаслідок рівності (3.19) розв'язком крайової задачі (3.1)(3.3) є функція

$$u(t, x) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\beta_n^2 + \gamma^2)t} \frac{V_0(x, \beta_n)}{\|V_0(x, \beta_n)\|_{l_0}^2} \int_{l_0}^{l_1} g(\xi) V_0(\xi, \beta_n) \sigma d\xi. \quad (3.26)$$

Звідси внаслідок початкової умови одержуємо при $t=0$ інтегральне зображення функції $g(x)$:

$$g(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{V_0(x, \beta_n)}{\|V_0(x, \beta_n)\|_{l_0}^2} \int_{l_0}^{l_1} g(\xi) V_0(\xi, \beta_n) \sigma d\xi. \quad (3.27)$$

Оскільки система функцій $\{V_0(x, \beta_n)\}_{n=1}^{\infty}$ є ортогональною в розумінні

$\|\dots\|_1$, повна й замкнута [18], то рівність (3.29) є рядом Фур'є для функції $g(x)$.

Вислідом цих міркувань є наступна теорема:

Теорема 3.1.3 (про розвинення в ряд Фур'є): Якщо функція $g(x) \in C^{(3)}(l_0, l_1)$ і задовольняє крайові умови

$$B_0[g] \equiv \left\{ \left[\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 (a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \gamma^2) \right] \frac{d}{dx} + \gamma_{11}^0 (a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \gamma^2) + \beta_{11}^0 \right\} g(x) \Big|_{x=l_0} = 0, \quad (3.28)$$

$$B_1[g] \equiv \left\{ \left[\alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 (a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \gamma^2) \right] \frac{d}{dx} + \gamma_{11}^1 (a^2 \frac{d^2}{dx^2} - \gamma^2) + \beta_{11}^1 \right\} g(x) \Big|_{x=l_1} = 0, \quad (3.29)$$

то вона зображається абсолютно й рівномірно збіжним рядом Фур'є (3.27).

Ряд Фур'є визначає пряме

$$F_n[g(x)] = \int_{l_0}^{l_1} g(x) V_0(x, \beta_n) \sigma dx \equiv g_n \quad (3.30)$$

та обернене

$$F_n^{-1}[g_n] = \sum_{n=1}^{\infty} g_n \frac{V_0(x, \beta_n)}{\|V_0(x, \beta_n)\|_1^2} \equiv g(x) \quad (3.31)$$

скінченне інтегральне перетворення Фур'є із спектральним параметром в крайових умовах.

Теорема 3.1.4 (про основну тотожність): Якщо функція $g(x) \in C^{(3)}(l_0, l_1)$ й задовольняє крайові умови

$$B_0[g] = g_0, \quad B_1[g] = g_1, \quad (3.32)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Фур'є $B = a^2 \frac{d^2}{dx^2}$:

$$\begin{aligned} F_n \left[a^2 \frac{d^2}{dx^2} g(x) \right] &= -\beta_n^2 g_n + (\tilde{\alpha}_{11}^1)^{-1} V_0(l_1, \beta_n) g_1 - (\tilde{\alpha}_{11}^0)^{-1} V_0(l_0, \beta_n) g_0 \equiv -\beta_n^2 g_n - \bar{\beta}_n \frac{v_{11}^{01}(\beta_n)}{v_{11}^{11}(\beta_n)} g_1 + \beta_0 g_0 \equiv \\ &\equiv -\beta_n^2 g_n + (\delta_{11}^0 \beta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0)^{-1} [\delta_{11}^0 V_0'(l_0, \beta_n) + \gamma_{11}^0 V_0(l_0, \beta_n)] + \\ &+ (\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \delta_{11}^1 \beta_{11}^1)^{-1} [\delta_{11}^1 V_0'(l_0, \beta_n) + \gamma_{11}^1 V_0(l_0, \beta_n)] \end{aligned} \quad (3.33)$$

Доведення: Тотожність (3.33) встановлюється безпосередньо методом інтегрування два рази частинами під знаком інтеграла з наступним використанням властивостей функцій $g(x)$ та $V_0(x, \beta_n)$.

3.1.2. Інтегральні перетворення Фур'є для напівобмежених однорідних середовищ переносу

Інтегральне перетворення Фур'є для напівобмеженого однорідного середовища пов'язане із крайовим оператором $B = -h_1 \frac{\partial}{\partial x} + h_2$, $h_1 \geq 0$, $h_2 \geq 0$, $h_1 + h_2 \neq 0$ побудовано й математично обґрунтовано у праці [18]. Побудуємо його з використанням ядра Коші як фундаментального розв'язку задачі Коші для параболічного рівняння дифузійного переносу при однорідній крайовій умові.

Розглянемо задачу побудови обмеженого в області $D^+ = \{(t, x) : t \in (0, \infty), x \in (0, \infty)\}$ розв'язку рівняння дифузії параболічного типу [30]

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - a^2 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = 0, a > 0, \gamma^2 \geq 0 \quad (3.34)$$

за початковою умовою

$$u(t, x)|_{t=0} = g(x) \quad (3.35)$$

та крайовими умовами:

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u|_{x=0} = 0, \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=\infty} = 0. \quad (3.36)$$

Вважаємо, що $\alpha_{11}^0 \leq 0$, $\beta_{11}^0 \geq 0$, $\delta_{11}^0 \geq 0$, $\gamma_{11}^0 \geq 0$, $|\alpha_{11}^0| + \beta_{11}^0 \neq 0$, $\delta_{11}^0 g'(0) + \gamma_{11}^0 g(0) = 0$.

Припустимо, що функція $u(t, x)$ є оригіналом за Лапласом щодо змінної t [15]. У зображенні за Лапласом маємо задачу побудови обмеженого в D^+ розв'язку рівняння:

$$\frac{d^2 u^*}{dx^2} - q^2 u^* = -\bar{g}(x); \bar{g} = a^{-2} g, q^2 = a^{-2} (p + \gamma^2), \gamma^2 \geq 0 \quad (3.37)$$

за крайовими умовами

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \bar{\beta}_{11}^0 \right) u^*(p, x) \Big|_{x=0} = 0, \quad \frac{du^*}{dx} \Big|_{x=\infty} = 0. \quad (3.38)$$

Зафіксуємо ту вітку двозначної функції $q = a^{-1}(p + \gamma^2)^{1/2}$, на якій $\Re q > 0$. Безпосередньо перевіряється, що розв'язком крайової задачі (3.37), (3.38) є функція:

$$u^*(p, x) = \int_{l_0}^l \mathcal{E}^*(p, x, \xi) \tilde{g}(\xi) d\xi \quad (3.39)$$

У формулі (3.39) бере участь фундаментальна функція крайової задачі (3.37), (3.38) [29]

$$\mathcal{E}^*(p, x, \xi) = \frac{e^{-q|x-\xi|}}{2q} + \frac{\bar{\alpha}_{11}^0 q + \bar{\beta}_{11}^0}{\bar{\alpha}_{11}^0 q - \bar{\beta}_{11}^0} \frac{e^{-q|x+\xi|}}{2q}. \quad (3.40)$$

Особливими точками функції $\mathcal{E}^*(p, x, \xi)$ є точки галуження $p = -\gamma^2$ та $p = \infty$. Внаслідок леми Жордана і теореми Коші [30] отримуємо формулу обчислення оригіналу фундаментальної функції:

$$\mathcal{E}(t, x, \xi) = L^{-1}[\mathcal{E}^*] \equiv \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \mathcal{E}^*(p, x, \xi) e^{pt} dp \equiv -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \Im \left[\mathcal{E}^*(e^{\pi i}(\gamma^2 + \beta^2), x, \xi) \right] e^{-(\gamma^2 + \beta^2)t} \beta d\beta. \quad (3.41)$$

Ми поклали $\sqrt{p + \gamma^2} = i\beta$, тобто $p = (\beta^2 + \gamma^2) \exp \pi i = -(\beta^2 + \gamma^2)$. При цьому $dp = -2\beta d\beta$.

Визначимо спектральну функцію

$$V(x, \beta) = \tilde{\beta}_{11}^0 \sin \bar{b}x - \tilde{\alpha}_{11}^0 \bar{b} \cos \bar{b}x$$

і спектральну густину $\tilde{\beta}_{11}^0 = \beta_{11}^0 - \gamma_{11}^0(\beta^2 + \gamma^2)$

$$\Omega(\beta) = b^{-1} \beta \left([\tilde{\beta}_{11}^0]^2 + \bar{b}^2 [\tilde{\alpha}_{11}^0]^2 \right)^{-1}, \quad \bar{b} = a^{-1} \beta, \quad \tilde{\alpha}_{11}^0 = \alpha_{11}^0 - \delta_{11}^0(\beta^2 + \gamma^2), \quad \tilde{\beta}_{11}^0 = \beta_{11}^0 - \gamma_{11}^0(\beta^2 + \gamma^2).$$

Згідно формули (3.41) маємо:

$$\mathcal{E}(t, x, \xi) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\gamma^2 + \beta^2)t} V(x, \beta) V(\xi, \beta) \Omega(\beta) d\beta \sigma a^2. \quad (3.42)$$

Розв'язком параболічної крайової задачі масопереносу (3.34)-(3.36) є функція:

$$u(t, x) = L^{-1} \left[u^*(p, x) \right] = \int_0^{\infty} \mathcal{E}(t, x, \xi) g(\xi) \sigma d\xi \quad \sigma = a^{-2}. \quad (3.43)$$

Внаслідок початкової умови (3.34) одержуємо інтегральне зображення:

$$g(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} V(x, \beta) \Omega(\beta) d\beta \int_0^{\infty} g(\xi) V(\xi, \beta) \sigma d\xi. \quad (3.44)$$

Інтегральне зображення (3.44) для напівобмеженої області $x \geq 0$ породжує пряме:

$$F_+ [g(x)] = \int_0^{\infty} g(x) V(x, \beta) \sigma dx \equiv \tilde{g}(\beta). \quad (3.45)$$

та обернене:

$$F_+^{-1} [\tilde{g}(\beta)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \tilde{g}(\beta) V(x, \beta) \Omega(\beta) d\beta \equiv g(x). \quad (3.46)$$

інтегральне перетворення Фур'є із спектральним параметром.

Результатом цих міркувань є справедливі наступні твердження .

Теорема 3.1.5: (про інтегральне зображення). Якщо функція $f(x)$ визначена, кусково – неперервна, абсолютно сумова й має обмежену варіацію на множині $(0, \infty)$, то справджується інтегральне зображення:

$$\frac{1}{2} [f(x-0) + f(x+0)] = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} V(x, \beta) \Omega(\beta) d\beta \int_0^{\infty} f(\xi) V(\xi, \beta) \sigma d\xi. \quad (3.47)$$

Теорема 3.1.6 (про основу тотожність): Якщо функція $f(x)$ має три неперервних похідних на множині $(0, \infty)$, тобто $f(x) \in C^{(3)}(0, \infty)$, зникає разом із своєю похідною першого порядку при $x \rightarrow \infty$, а в точці $x = l_0$ задовольняє крайову умову:

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) f(x) \Big|_{x=l_0} = f_0 \equiv \text{const}, \quad (3.48)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення

диференціального оператора Фур'є $\mathcal{F} = a^2 \frac{d^2}{dx^2}$:

$$F + \left[a^2 \frac{d^2 f}{dx^2} \right] = -\beta^2 \tilde{f}(\beta) + a^{-1} \beta f_0. \quad (3.49)$$

Доведення: Доведення тотожності (3.49) встановлюється безпосередньо методом подвійного інтегрування частинами під знаком інтегралу з використанням властивостей власних функцій $V(x, \beta)$ та умови (3.49)

Логічні схеми застосувань запроваджених інтегральних перетворень до типових задач масопереносу подано в [20].

3.2. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для обмежених неоднорідних n -складових середовищ переносу

Розглянемо задачу Штурма-Ліувілля про конструкцію на множині

$$I_n = \left\{ z : z \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (l_{j-1}, l_j); l_0 \geq 0, l_{n+1} = l < \infty \right\} \quad \text{ненульового розв'язку системи}$$

диференціальних рівнянь Фур'є другого порядку

$$L_j[V_j] = \left(\frac{d^2}{dz^2} + \bar{b}_j^2 \right) V_j = 0; \quad \bar{b}_j^2 = \frac{1}{D_j} (\beta^2 + \gamma_j^2)^{1/2}, \quad j = \overline{1, n+1} \quad (3.50)$$

за крайовими умовами

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) V_1 \Big|_{z=l_0} = 0, \quad \left(\tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} \right) V_{n+1} \Big|_{z=l_{n+1}} = 0 \quad (3.51)$$

та системою n -інтерфейсних умов

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) V_k - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) V_{k+1} \right] \Big|_{z=l_k} = 0, \quad j = 1, 2, k = \overline{1, n}. \quad (3.52)$$

У рівностях (3.50) - (3.52) беруть участь величини:

$$a_j > 0, \gamma_j^2 \geq 0, \beta \in (0, \infty); |\alpha_{11}^0| + |\beta_{11}^0| \neq 0, |\alpha_{22}^{n+1}| + |\beta_{22}^{n+1}| \neq 0; \tilde{\alpha}_{jk}^m = \alpha_{jk}^m - \delta_{jk}^m (\beta^2 + \gamma^2); \\ \tilde{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_k^m (\beta^2 + \gamma^2), m = 0, n+1; \gamma^2 = \max\{\gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_{n+1}^2\}.$$

$$\text{Запишемо числові матриці } A_{j1,k} = \begin{bmatrix} \alpha_{1j}^k \beta_{1j}^k \\ \alpha_{2j}^k \beta_{2j}^k \end{bmatrix}, \quad A_{j2,k} = \begin{bmatrix} \delta_{1j}^k \gamma_{1j}^k \\ \delta_{2j}^k \gamma_{2j}^k \end{bmatrix}; \quad j = 1, 2; k = \overline{1, n}$$

та числа:

$$c_{j1,k} = -\det A_{j1,k} \equiv \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k, \quad c_{j2,k} = -\det A_{j2,k} \equiv \delta_{2j}^k \gamma_{1j}^k - \delta_{1j}^k \gamma_{2j}^k, \quad j = 1, 2; k = \overline{1, n}; \\ c_{11,12}^{12} = \alpha_{11}^k \gamma_{21}^k - \alpha_{21}^k \gamma_{11}^k, c_{11,12}^{21,k} = \beta_{11}^k \delta_{21}^k - \beta_{21}^k \delta_{11}^k, \quad c_{21,22}^{12,k} = \alpha_{12}^k \gamma_{22}^k - \alpha_{22}^k \gamma_{12}^k, c_{21,22}^{21,k} = \beta_{12}^k \delta_{22}^k - \beta_{22}^k \delta_{12}^k. \quad (3.53)$$

Вимагатимемо при цьому також виконання співвідношень:

$$c_{11,k} c_{21,k} > 0; c_{j2,k} = 0; c_{11,12}^{12,k} = c_{11,12}^{21,k}; c_{21,22}^{12,k} = c_{21,22}^{21,k}; \quad j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (3.54)$$

Фундаментальну систему розв'язків для рівняння $L_j[V] = 0$ утворюють функції $\cos q_j z$ та $\sin q_j z$, $q_j \equiv \bar{b}_j$, тому розв'язок крайової задачі (3.50) - (3.52) шукаємо у вигляді

$$V_j(z, \beta) = A_j(\beta) \cos q_j z + B_j(\beta) \sin q_j z, \quad j = \overline{1, n+1}.$$

Крайові умови (3.51) та система n -інтерфейсних умов (3.52) для визначення довільних сталих A_j та B_j дають алгебраїчну систему з $(2n+2)$ рівнянь

$$\left. \begin{aligned} & \tilde{v}_{11}^{01}(q_1 l_0) A_1 + \tilde{v}_{11}^{02}(q_1 l_0) B_1 = 0 \\ & \tilde{v}_{j1}^{k1}(q_k l_k) A_k + \tilde{v}_{j1}^{k2}(q_k l_k) B_k - \tilde{v}_{j2}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - \tilde{v}_{j2}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = 0, \quad j=1,2; k=\overline{1,n} \\ & \tilde{v}_{22}^{n+1,1}(q_{n+1} l) A_{n+1} + \tilde{v}_{22}^{n+1,2}(q_{n+1} l) B_{n+1} = 0 \end{aligned} \right\} \quad (3.55)$$

Для того, щоб алгебраїчна система (3.55) мала ненульовий розв'язок, необхідно і достатньо щоб її визначник був рівний нулю

$$\delta_n(\beta) \equiv -\omega_{n1}(\beta) \cdot \tilde{v}_{22}^{n+1,2}(q_{n+1} l) + \omega_{n2}(\beta) \cdot \tilde{v}_{22}^{n+1,1}(q_{n+1} l) = 0. \quad (3.56)$$

Тут

$$\tilde{v}_{ij}^{k1}(q_s l_m) \equiv \left(\tilde{\alpha}_{ij}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{ij}^k \right) \cos q_s z \Big|_{z=l_m} = -\tilde{\alpha}_{ij}^k q_s \sin q_s l_m + \tilde{\beta}_{ij}^k \cos q_s l_m,$$

$$\tilde{v}_{ij}^{k2}(q_s l_m) \equiv \left(\tilde{\alpha}_{ij}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{ij}^k \right) \sin q_s z \Big|_{z=l_m} = -\tilde{\alpha}_{ij}^k q_s \cos q_s l_m + \tilde{\beta}_{ij}^k \sin q_s l_m;$$

$$\psi_{jm}^k(z, y) = \tilde{v}_{11}^{kj}(z) \tilde{v}_{22}^{km}(y) - \tilde{v}_{21}^{kj}(z) \tilde{v}_{12}^{km}(y); \omega_{01}(\beta) = -\tilde{v}_{11}^{01}(q_1 l_0), \omega_{02}(\beta) = -\tilde{v}_{11}^{02}(q_1 l_0);$$

$$\omega_{jm}(\beta) = \omega_{j-1,2}(\beta) \psi_{1m}^j(q_j l_j, q_{j+1} l_j) - \omega_{j-1,1}(\beta) \psi_{2m}^j(q_j l_j, q_{j+1} l_j).$$

Теорема 3.2.1 (про дискретний спектр). Корені $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m, \dots$ трансцендентного рівняння (3.56) утворюють дискретний спектр: корені дійсні, прості, (за винятком, можливо, нуля), симетрично розташовані відносно нуля і утворюють в області $\beta > 0$ монотонно зростаючу послідовність з єдиною граничною точкою $\beta = +\infty$.

Доведення: Доведення теореми проводиться з використанням методики праць [6, 9]. Покажемо що спектр власних чисел складають дійсні числа. Припустивши, що власним числом крайової задачі (3.50)-(3.52) є комплексне число $\beta = \sigma + is$, якому відповідає власна-вектор функція $V(z, \beta)$. У той же час власним числом буде і спряжене до нього $\beta = \sigma - is$, якому відповідає власна-вектор функція $\tilde{V}(z, \tilde{\beta})$. Так як $V(z, \beta)$ і $\tilde{V}(z, \tilde{\beta})$ є власними вектор-функціями, що відповідають різним власним числам, то для виконується умова ортогональності (для різних β вони узагальнено ортогональними):

$$..0 = \int_{l_0}^l V(z, \beta) \tilde{V}(z, \tilde{\beta}) \sigma(z) dz = \int_{l_0}^l [V]^2 \sigma(z) dz = \|V\|^2,$$

звідки випливає рівність $V(z, \beta) = 0$, що неможливо, а отже, власні числа не є комплексними, а є дійсними. Симетричність коренів тут очевидна.

Те що корені $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_m, \dots$ різні можна показати методом від супротивного. Оскільки $\delta_n(\beta)$ є цілою аналітичною функцією від β , то трансцендентне рівняння (3.56) має зліченну множину коренів, які не мають скінченної граничної точки [38]. Це означає, що $\lim_{m \rightarrow \infty} \beta_m = \infty$. Теорема доведена.

Дискретному спектру власних чисел β_n відповідає дискретна власна вектор-функція $V(z, \beta_m) = \{V_1(z, \beta_m), V_2(z, \beta_m), \dots, V_n(z, \beta_m), V_{n+1}(z, \beta_m)\}$. Структура функцій $V_k(z, \beta_m)$ одержується наступним способом. Підставимо в систему (3.55) $\beta = \beta_m$ і відкинемо останнє рівняння внаслідок їх лінійної залежності. Покладемо $A_1 = -A_0 \tilde{D}_{11}^{02}(q_{1m} l_0) \equiv A_0 \omega_{02}(\beta_m)$, $B_1 = A_0 \tilde{D}_{11}^{01}(q_{1m} l_0) \equiv -A_0 \omega_{01}(\beta_m)$. За першу компоненту власної вектор-функції, визначеної на інтервалі (l_0, l_1) візьмемо функцію

$$V_1(z, \beta_m) = A_0(\beta_m) [\omega_{02}(\beta_m) \cos q_{1m} z - \omega_{01}(\beta_m) \sin q_{1m} z], \quad q_{jn} = \frac{1}{\sqrt{D_j}} (\beta_m^2 + \gamma_j^2)^{1/2}, \quad \gamma_j^2 \geq 0, \quad j = \overline{1, n+1}.$$

Коефіцієнт A_0 підлягає визначенню. Решта рівнянь розпадається на n сепаратних систем по два рівняння в кожній. Внаслідок рекурентних залежностей

$$A_{k+1} = \frac{1}{c_{21, k} q_{k+1, m}} [A_k \psi_{12}^k(q_{km} l_k, q_{k+1, m} l_k) + B_k \psi_{22}^k(q_{km} l_k, q_{k+1, m} l_k)],$$

$$B_{k+1} = \frac{1}{c_{21, k} q_{k+1, m}} [A_k \psi_{11}^k(q_{km} l_k, q_{k+1, m} l_k) + B_k \psi_{21}^k(q_{km} l_k, q_{k+1, m} l_k)], \quad k = \overline{1, n}$$

одержуємо, що

$$A_k = \frac{A_0}{\prod_{i=1}^k c_{21, i} q_{i+1, m}} \omega_{k2}(\beta_m); \quad B_{k+1} = \frac{A_0}{\prod_{i=1}^k c_{21, i} q_{i+1, m}} \omega_{k1}(\beta_m). \quad (3.57)$$

Якщо покласти $A_0 = \prod_{i=1}^n c_{21, i} q_{i+1, m}$; $G_k(z, \beta_m) = \omega_{k-1, 2}(\beta_m) \cos q_{km} z - \omega_{k-1, 1}(\beta_m) \sin q_{km} z$,

то компоненти V_k спектральної вектор-функції $V(z, \beta_m)$ будуть визначені:

$$V_k(z, \beta_m) = \left(\prod_{i=k}^n c_{21, i} q_{i+1, m} \right) G_k(z, \beta_m), \quad k = \overline{1, n}; \quad (3.58)$$

$$V_{n+1}(z, \beta_m) = \omega_{n2}(\beta_m) \cos q_{n+1, m} z - \omega_{n1}(\beta_m) \sin q_{n+1, m} z.$$

Якщо $\theta(x)$ - одинична функція Хевісайда, то спектральна вектор-функція запишеться у вигляді

$$V(z, \beta_j) = \sum_{k=1}^{n+1} V_k(z, \beta_j) \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z). \quad (3.59)$$

Теорема 3.2.2 (про дискретну функцію). Система власних функцій $\{V(z, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$ диференціального оператора Фур'є F_n , визначеного рівністю (3.3.0), узагальнено ортогональна, повна й замкнута на множині I_n .

Доведення: Покажемо, що система власних вектор-функцій $\{V(z, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$ узагальнено ортогональна на множині I_n з ваговою функцією

$$\sigma(z) = \sum_{k=1}^{n+1} \sigma_k \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z),$$

$$\sigma_k = \frac{1}{D_k} \prod_{m=k}^n \frac{c_{11,m}}{c_{21,m}}, \quad k = \overline{1, n}, \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}}.$$

Дійсно, розглянемо дві власні вектор функції $V(z, \beta_j)$ $V(z, \beta_m)$, які відповідають власним значенням $\beta_j \neq \beta_m$. З тотожностей

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + q_{sj}^2 \right) V_s(z, \beta_j) \equiv 0,$$

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} + q_{sm}^2 \right) V_s(z, \beta_m) \equiv 0, \quad s = \overline{1, n+1}$$

одержуємо співвідношення

$$V_s(z, \beta_m) V_s(z, \beta_j) = \frac{a_s^2}{\beta_m^2 - \beta_j^2} \frac{d}{dz} \left[V_s(z, \beta_m) \frac{d}{dz} V_s(z, \beta_j) - V_s(z, \beta_j) \frac{d}{dz} V_s(z, \beta_m) \right]. \quad (3.60)$$

Помножимо рівність (3.60) на $\sigma_z dz$, про інтегруємо від l_{s-1} до l_s і просумуємо по s від 1 до $n+1$. В результаті одержимо рівність

$$\begin{aligned} \int_{l_0}^{l_{n+1}} V(z, \beta_j) V(z, \beta_m) \sigma(z) dz &= \sum_{s=1}^{n+1} \frac{\sigma_s a_s^2}{\beta_m^2 - \beta_j^2} \left[V_s(z, \beta_m) \frac{d}{dz} V_s(z, \beta_j) - V_s(z, \beta_j) \frac{d}{dz} V_s(z, \beta_m) \right] \Big|_{l_{s-1}}^{l_s} = \\ &= \frac{1}{\beta_m^2 - \beta_j^2} \left\{ \sigma_1 a_1^2 \left[V_1(l_0, \beta_m) \frac{d}{dz} V_1(l_0, \beta_j) - V_1(l_0, \beta_j) \frac{d}{dz} V_1(l_0, \beta_m) \right] + \left[V_{n+1}(l, \beta_m) \frac{d}{dz} V_{n+1}(l, \beta_j) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - V_{n+1}(l, \beta_j) \frac{d}{dz} V_{n+1}(l, \beta_m) \right] + \sum_{k=1}^n \left[a_k^2 \sigma_k (V_k(z, \beta_m) V_{k'}(z, \beta_j) - V_k(z, \beta_j) V_{k'}(z, \beta_m)) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - a_{k+1}^2 \sigma_k (V_{k+1}(z, \beta_m) V_{k'+1}(z, \beta_j) - V_{k+1}(z, \beta_j) V_{k'+1}(z, \beta_m)) \right] \Big|_{z=l_k} \right\}. \quad (3.61) \end{aligned}$$

Розглянемо матриці $\tilde{A}_{11,k} = \begin{bmatrix} \tilde{\alpha}_{11}^k & \tilde{\beta}_{11}^k \\ \tilde{\alpha}_{21}^k & \tilde{\beta}_{21}^k \end{bmatrix}$, $\tilde{A}_{12,k} = \begin{bmatrix} \tilde{\alpha}_{12}^k & \tilde{\beta}_{12}^k \\ \tilde{\alpha}_{22}^k & \tilde{\beta}_{22}^k \end{bmatrix}$ і визначимо числа

$$\tilde{c}_{11,12}^{11,k} = \tilde{\alpha}_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k - \tilde{\alpha}_{21}^k \tilde{\alpha}_{12}^k, \quad c_{11,12}^{12,k} = \tilde{\alpha}_{11}^k \tilde{\beta}_{22}^k - \tilde{\alpha}_{21}^k \tilde{\beta}_{12}^k,$$

$$\tilde{c}_{11,12}^{21,k} = \tilde{\beta}_{11}^k \tilde{\alpha}_{22}^k - \tilde{\beta}_{21}^k \tilde{\alpha}_{12}^k, \quad \tilde{c}_{11,12}^{22,k} = \tilde{\beta}_{11}^k \tilde{\beta}_{22}^k - \tilde{\beta}_{21}^k \tilde{\beta}_{12}^k.$$

Оскільки $\tilde{\alpha}_{11}^k(\beta) \tilde{\beta}_{21}^k(\beta) - \tilde{\alpha}_{21}^k(\beta) \tilde{\beta}_{11}^k(\beta) = -\tilde{c}_{11,k} + (\tilde{c}_{11,12}^{12,k} - \tilde{c}_{11,12}^{21,k}) \beta^2 - \tilde{c}_{12,k} \beta^4 = -\tilde{c}_{11,k} \neq 0$, то алгебраїчна система

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{11}^k V_{k'}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{11}^k V_k(l_k, \beta) &= \tilde{\alpha}_{12}^k V_{k'+1}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{12}^k V_{k+1}(l_k, \beta), \\ \tilde{\alpha}_{21}^k V_{k'}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{21}^k V_k(l_k, \beta) &= \tilde{\alpha}_{22}^k V_{k'+1}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{22}^k V_{k+1}(l_k, \beta), \end{aligned} \quad (3.62)$$

відносно $V_k(l_k, \beta)$ та $V_{k'}(l_k, \beta)$ має єдиний розв'язок

$$\begin{aligned} V_k(l_k, \beta) &= -\frac{1}{c_{11,k}} \left[\tilde{c}_{11,12}^{12,k}(\beta) V_{k+1}(l_k, \beta) + \tilde{c}_{11,12}^{11,k}(\beta) V_{k'+1}(l_k, \beta) \right], \\ V_{k'}(l_k, \beta) &= \frac{1}{c_{11,k}} \left[\tilde{c}_{11,12}^{22,k}(\beta) V_{k+1}(l_k, \beta) + \tilde{c}_{11,12}^{21,k}(\beta) V_{k'+1}(l_k, \beta) \right]. \end{aligned} \quad (3.63)$$

Поклавши для простоти $\beta_m \equiv \beta$, $\beta_j \equiv \lambda$, розглянемо вираз

$$\begin{aligned}
V_k(l_k, \beta)V'_k(l_k, \lambda) - V_k(l_k, \lambda)V'_k(l_k, \beta) &= \frac{1}{c_{11,k}^2} \{A_{11}(\lambda, \beta)V'_{k+1}(l_k, \lambda)V'_{k+1}(l_k, \beta) + \\
&+ A_{12}(\lambda, \beta)V_{k+1}(l_k, \beta)V'_{k+1}(l_k, \lambda) + A_{21}(\lambda, \beta)V_{k+1}(l_k, \lambda)V'_{k+1}(l_k, \beta) + A_{22}(\lambda, \beta)V_{k+1}(l_k, \lambda)V'_{k+1}(l_k, \beta)\}, \\
A_{ij}(\lambda, \beta) &= \tilde{c}_{11,12}^{li,k}(\lambda)\tilde{c}_{11,12}^{2j,k}(\beta) - \tilde{c}_{11,12}^{2i,k}(\lambda)\tilde{c}_{11,12}^{li,k}(\beta); i, j = 1, 2; \quad k = \overline{1, n}.
\end{aligned} \tag{3.64}$$

Безпосередніми підрахунками встановлюємо рівності:

$$\begin{aligned}
\tilde{\alpha}_{11}^k(\lambda)\tilde{\beta}_{11}^k(\beta) - \tilde{\alpha}_{11}^k(\beta)\tilde{\beta}_{11}^k(\lambda) &= -(\beta^2 - \lambda^2)\alpha_{11}^k, \quad \alpha_{11}^k = \alpha_{11}^k\gamma_{11}^k - \delta_{11}^k\beta_{11}^k \geq 0; \\
\tilde{\alpha}_{21}^k(\lambda)\tilde{\beta}_{21}^k(\beta) - \tilde{\alpha}_{21}^k(\beta)\tilde{\beta}_{21}^k(\lambda) &= -(\beta^2 - \lambda^2)\alpha_{22}^k, \quad \alpha_{22}^k = \alpha_{21}^k\gamma_{21}^k - \delta_{21}^k\beta_{21}^k \geq 0; \\
\tilde{\alpha}_{21}^k(\beta)\tilde{\beta}_{11}^k(\lambda) - \tilde{\alpha}_{11}^k(\lambda)\tilde{\beta}_{21}^k(\beta) &= c_{11,k} - (\beta^2 - \lambda^2)\alpha_{12,1}^k; \\
\alpha_{12,1}^k &= \delta_{11}^k\beta_{21}^k - \alpha_{21}^k\gamma_{11}^k \equiv \alpha_{12,2}^k = \delta_{11}^k\beta_{21}^k - \alpha_{11}^k\gamma_{21}^k.
\end{aligned} \tag{3.65}$$

Внаслідок рівностей (3.65) маємо:

$$\begin{aligned}
A_{22}(\lambda, \beta) &= -(\beta^2 - \lambda^2) \left[\alpha_{11}^k\tilde{\beta}_{22}^k(\beta)\tilde{\beta}_{22}^k(\lambda) + \alpha_{22}^k\tilde{\beta}_{12}^k(\lambda)\tilde{\beta}_{12}^k(\beta) + \alpha_{12}^k(\tilde{\beta}_{12}^k(\beta)\tilde{\beta}_{22}^k(\lambda) + \tilde{\beta}_{12}^k(\lambda)\tilde{\beta}_{22}^k(\beta)) - c_{11,k}c_{21,22}^{22,k} \right]; \\
A_{11}(\lambda, \beta) &= -(\beta^2 - \lambda^2) \left[\alpha_{11}^k\tilde{\alpha}_{22}^k(\beta)\tilde{\alpha}_{22}^k(\lambda) + \alpha_{22}^k\tilde{\alpha}_{12}^k(\lambda)\tilde{\alpha}_{12}^k(\beta) + \alpha_{12}^k(\tilde{\alpha}_{12}^k(\beta)\tilde{\alpha}_{22}^k(\lambda) + \tilde{\alpha}_{12}^k(\lambda)\tilde{\alpha}_{22}^k(\beta)) - c_{11,k}c_{21,22}^{11,k} \right]; \\
A_{12}(\lambda, \beta) &= -(\beta^2 - \lambda^2) \left[\alpha_{11}^k\tilde{\alpha}_{22}^k(\beta)\tilde{\beta}_{22}^k(\lambda) + \alpha_{22}^k\tilde{\alpha}_{12}^k(\lambda)\tilde{\beta}_{12}^k(\beta) + \alpha_{12}^k(\tilde{\alpha}_{22}^k(\lambda)\tilde{\beta}_{12}^k(\beta) + \tilde{\alpha}_{12}^k(\lambda)\tilde{\beta}_{22}^k(\beta)) - \right. \\
&\left. - c_{11,k}c_{21,22}^{12,k} \right] c_{11,k}c_{21,k}.
\end{aligned}$$

Визначимо функції $z_{jk}(\beta) = \tilde{\alpha}_{j2}^k(\beta)V'_{k+1}(l_k, \beta) + \tilde{\beta}_{j2}^k(\beta)V'_{k+1}(l_k, \beta)$, $j = 1, 2$. В результаті підстановки рівностей (3.66) в (3.64) одержуємо:

$$\begin{aligned}
V_k(l_k, \beta)V'_k(l_k, \lambda) - V_k(l_k, \lambda)V'_k(l_k, \beta) &= -c_{11,k}^{-1}(\beta^2 - \lambda^2) \{ \alpha_{11}^k z_{2k}(\lambda) z_{2k}(\beta) + \alpha_{22}^k z_{1k}(\lambda) z_{1k}(\beta) + \\
&\alpha_{12}^k (z_{1k}(\beta) z_{2k}(\lambda) + z_{1k}(\lambda) z_{2k}(\beta)) - c_{11,k} (c_{21,22}^{11,k} V'_{k+1}(l_k, \beta) V'_{k+1}(l_k, \lambda) + c_{21,22}^{11,k} V_{k+1}(l_k, \lambda) V'_{k+1}(l_k, \beta)) + \\
&c_{21,22}^{12,k} (V_{k+1}(l_k, \beta) V'_{k+1}(l_k, \lambda) + V_{k+1}(l_k, \lambda) V'_{k+1}(l_k, \beta)) \} + c_{11,k} c_{21,k} \times \\
&\times [V_{k+1}(l_k, \beta) V'_{k+1}(l_k, \lambda) - V_{k+1}(l_k, \lambda) V'_{k+1}(l_k, \beta)].
\end{aligned} \tag{3.67}$$

Оскільки $(\alpha_{12}^k)^2 - \alpha_{11}^k \alpha_{22}^k \equiv \alpha_{12,1}^k \alpha_{12,2}^k - \alpha_{11}^k \alpha_{22}^k = -c_{11,k} c_{12,k}^k = -c_{11,k} \cdot 0 = 0$,

$(c_{21,22}^{12,k})^2 - c_{21,22}^{11,k} c_{21,22}^{22,k} \equiv c_{21,22}^{12,k} c_{21,22}^{21,k} - c_{21,22}^{11,k} c_{21,22}^{22,k} = -c_{21,k} c_{22,k} = 0$, то сума (3.61) набуває вигляду:

$$\begin{aligned}
& - \sum_{k=1}^n c_{11,k}^{-2} \alpha_k^2 \sigma_k \left\{ \left[\sqrt{\alpha_{11}^k} z_{2k}(\lambda) + \sqrt{\alpha_{22}^k} z_{1k}(\lambda) \right] \left[\sqrt{\alpha_{11}^k} z_{2k}(\beta) + \sqrt{\alpha_{22}^k} z_{1k}(\beta) \right] + c_{11,k} \left[\sqrt{-c_{21,22}^{11,k}} V'_{k+1}(l_k, \lambda) + \right. \right. \\
& \left. \left. + \sqrt{-c_{21,22}^{22,k}} V_{k+1}(l_k, \lambda) \right] \left[\sqrt{-c_{21,22}^{11,k}} V'_{k+1}(l_k, \beta) + \sqrt{-c_{21,22}^{22,k}} V_{k+1}(l_k, \beta) \right] \right\} (\beta^2 - \lambda^2) \equiv -(\beta^2 - \lambda^2) G_n(\beta, \lambda).
\end{aligned} \tag{3.68}$$

Вважаємо, що $c_{21,22}^{11,k} = \alpha_{12}^k \delta_{22}^k - \alpha_{22}^k \delta_{12}^k \leq 0$, $c_{21,22}^{22,k} = \beta_{12}^k \gamma_{22}^k - \beta_{22}^k \gamma_{12}^k \leq 0$. В точці $z = l_0$ при $\gamma^2 = 0$ (для простоти) маємо тотожні рівності:

$$\begin{aligned}
\alpha_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_n) + \beta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_n) - \beta_n^2 [\delta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_n) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_n)] &= 0, \\
\alpha_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) + \beta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) - \beta_j^2 [\delta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j)] &= 0.
\end{aligned} \tag{3.69}$$

З одного боку

$$\begin{aligned}
& [\alpha_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_m) + \beta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_m)] [\delta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j)] - [\alpha_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) + \beta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j)] \times \\
& \times [\delta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m)] = (\alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0 - \delta_{11}^0 \beta_{11}^0) [V_1(l_0, \beta_j) V'_1(l_0, \beta_m) - V_1(l_0, \beta_m) V'_1(l_0, \beta_j)]
\end{aligned} \tag{3.70}$$

З другого боку, внаслідок рівностей (3.69) маємо

$$\begin{aligned} & \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \beta_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] - \left[\alpha_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \beta_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] \times \\ & \times \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] = \beta_m^2 \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \times \\ & \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] - \beta_j^2 \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] = \\ & = (\beta_m^2 - \beta_j^2) \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] \end{aligned} \quad (3.71)$$

Із рівностей (3.70) та (3.71) знаходимо, що

$$\begin{aligned} & V_1(l_0, \beta_m) V_1'(l_0, \beta_m) - V_1(l_0, \beta_j) V_1'(l_0, \beta_j) = \\ & = \frac{(\beta_m^2 - \beta_j^2)}{\delta_{11}^0 \beta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0} \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right]. \end{aligned} \quad (3.72)$$

Аналогічно знаходимо, що

$$\begin{aligned} & V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_m) V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_j) - V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_m) = \\ & = \frac{(\beta_m^2 - \beta_j^2)}{\delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1} - \alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1}} \left[\delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_m) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_m) \right] \cdot \left[\delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) \right]. \end{aligned} \quad (3.73)$$

Підстановка рівностей (3.68), (3.72) та (3.73) в (3.61) приводить до співвідношення:

$$\begin{aligned} & \int_{l_0}^{l_{n+1}} V(z, \beta_m) V(z, \beta_j) \sigma(z) dz = - \frac{\sigma_1 \alpha_1^2}{-\alpha_{11}^0 \beta_{11}^0 + \delta_{11}^0 \gamma_{11}^0} \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \times \\ & \times \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right] - \frac{\sigma_{n+1} \alpha_{n+1}^2}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1}} \left[\delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_m) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_m) \right] \times \\ & \times \left[\delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) \right] - G_n^{(1)}(\beta_m, \beta_j) \equiv -G_n^{(1)}(\beta_m, \beta_j) \end{aligned} \quad (3.74)$$

Якщо визначити узагальнений скалярний добуток [4]

$$\left(V(z, \beta_m), V(z, \beta_j) \right)_1 = \left(V(z, \beta_m) V(z, \beta_j) \right) + G_n^{(1)}(\beta_m, \beta_j), \quad (3.75)$$

де класичний скалярний добуток $\left(V(z, \beta_m) V(z, \beta_j) \right) = \int_{l_0}^{l_{n+1}} V(z, \beta_m) V(z, \beta_j) \sigma(z) dz$,

то з рівності (3.74) випливає, що для всіх $\beta_m \neq \beta_j$ $\left(V(z, \beta_m), V(z, \beta_j) \right)_1 = 0$.

Остання рівність означає, що система власних функцій узагальнено ортогональна.

Рівність (3.75) породжує квадрат норми власної функції $V(z, \beta_j)$:

$$\|V(z, \beta_j)\|_1^2 = \|V(z, \beta_j)\|^2 + G_n^{(1)}(\beta_j, \beta_j). \quad (3.76)$$

Стандартним способом [9] можна показати, що узагальнено ортогональна на множині I_n система вектор функцій $\{V(z, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$ є повною і замкненою.

Справедливі наступні твердження.

Теорема 3.2.3 (типу теореми Стеклова): Будь-яка тричі неперервно диференційована на множині I_n вектор-функція $f(z)$, яка задовольняє крайові умови (3.51) та систему інтерфейсних умов (3.52) зображається на кожній компактній множині $I_n^* \subset I_n$ абсолютно і рівномірно збіжним рядом Фур'є за системою власних вектор-функцій $\{V(z, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty}$:

$$f(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \int_{I_0}^l f(\xi) V(\xi, \beta_j) \sigma(\xi) d\xi \frac{V(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|^2} \quad (3.77)$$

Доведення: Доведення теореми ґрунтується на використанні підходу роботи [9]. З врахуванням того, що вектор-функція $f \in C^2(I_n)$, задовольняє крайові та інтерфейсні умови крайової задачі та при допомозі функцій впливу задачі, враховуючи, що $L_k[f_k(z)] = g_k(z) \sqrt{\sigma_k}$, $k = \overline{1, n+1}$, де $g(z)$ - визначена з допомогою f та оператора L неперервна вектор-функція в I_n , отримаємо:

$$f_m(z) = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} \mathcal{H}_{mk}(z, \xi) \sqrt{\sigma_k} g_k(\xi) d\xi = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_k}^{I_{k+1}} \mathcal{K}_{mk}(z, \xi) g_k(\xi) d\xi \quad (3.78)$$

де ядра $\mathcal{K}_{mk}(z, \xi) = \mathcal{H}_{mk}(z, \xi) \sqrt{\sigma_m \sigma_k}$ ($m \leq k$) є також узагальнено-симетричними відносно діагоналі $z = \xi$: $\mathcal{K}_{mk}(z, \xi) = - \prod_{s=i}^{k-1} \frac{c_{1s}}{c_{2s}} \mathcal{K}_{km}(\xi, z)$. Вигляд функцій впливу $\mathcal{H}_{mk}(z, \xi)$, $m, k = \overline{1, n+1}$ для неоднорідної крайової задачі переносу для обмежених неоднорідних середовищ детально описаний в п.4.2.

Запишемо крайову задачу Штурма-Ліувілля (3.50)-(3.52) в інтегральній формі відносно функцій $\varphi_m(z, \beta) \equiv \sqrt{\sigma_m} \frac{V_m(z, \beta)}{\|V(z, \beta)\|}$ через функції впливу:

$$\frac{V_m(z, \beta)}{\|V(z, \beta)\|} = \beta^2 \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^k \mathcal{H}_{mk}(z, \xi) \sigma_k \frac{V_m(\xi, \beta)}{\|V(z, \beta)\|} d\xi.$$

Ця постановка означає, що власні числа та власні вектор-функції для задачі (3.50)-(3.52) є відповідно характеристичними числами характеристичними вектор-функціями системи інтегральних рівнянь:

$$\frac{V_m(z, \beta)}{\|V(z, \beta)\|} = \beta^2 \sum_{i=1}^{n+1} \int_{I_{i-1}}^i \mathcal{K}_{mi}(z, \xi) \sqrt{\frac{\sigma_k}{\sigma_m}} \frac{V_k(\xi, \beta)}{\|V(z, \beta)\|} d\xi; \quad n = \overline{1, n}. \quad (3.79)$$

Так як $V_m(z, \beta_j)$ є узагальнено ортонормованими з вагою σ_m вектор-функції крайової задачі, то маємо $\sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_k}^{I_{k+1}} \frac{V_k(z, \beta_j) V_k(z, \beta_i)}{\|V(z, \beta_i)\|^2} \sigma(z) dz = \delta_{ji}$.

Ядра $\mathcal{K}_{ik}(z, \xi)$ системи інтегральних рівнянь (3.79) є неперервні при $\{z, \xi\} \subset I_n$, рівномірно обмежені по z , а тому є інтегровані з квадратом по змінній

ξ : $\sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} \mathcal{K}_{mk}^2(z, \xi) d\xi < \mu = \text{const} < \infty$ і їх як функції змінної ξ можна формально

розвинути в ряд Фур'є за системою власних функцій:

$$\mathcal{K}_{mk}(z, \xi) \sim \sum_{j=1}^{\infty} a_m(z, \beta_j) \sqrt{\sigma_k} \frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|};$$

де за означенням: $a_m(z, \beta_j) = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} \mathcal{K}_{mk}(z, \xi) \sqrt{\sigma_k} \frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} d\xi = \sqrt{\sigma_k} \frac{V_m(\xi, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|}$, (згідно (3.79)).

Отже,

$$\mathcal{K}_{mk}(z, \xi) \sim \sum_{j=1}^{\infty} \frac{V_m(z, \beta_j) V_k(\xi, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|^2} \sqrt{\sigma_m \sigma_k}, \quad m, j = \overline{1, n+1}. \quad (3.80)$$

Згідно з нерівністю Бесселя, що має місце для ряду правої частини (3.80) справедлива оцінка :

$$\sum_{j=1}^{\infty} \left[\frac{V_m(z, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|^2} \sigma_m \right]^2 \leq \sum_{k=1}^{\infty} \int_{I_{k-1}}^{I_k} \mathcal{K}_{mk}^2(z, \xi) d\xi < \infty. \quad (3.81)$$

Вектор-функцію g з (3.778, неперервну на I_n розвинемо в ряд Фур'є за системою ортонормованих вектор-функцій $\frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|}$:

$$g_m(\xi) \sim \sum_{j=1}^{\infty} b(\beta_j) \frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} \sqrt{\sigma_m}; \quad (3.82)$$

$$\text{Тут } b(\beta_j) = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} g_k(\xi) \frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} \sqrt{\sigma_k} d\xi; \quad \sum_{j=1}^{\infty} b(\beta_j)^2 \leq \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} g_k^2(\xi) d\xi < \infty \quad (\text{згідно}$$

нерівності Бесселя), тобто ряд з членом $b(\beta_j)^2$ збігається.

Розвинемо за системою вектор-функцій $\frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|}$ формально в ряд Фур'є

так же ліву частину частини рівності (3.78):

$$f_m(z) \sim \sum_{j=1}^{\infty} \gamma(\beta_j) \frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} \quad (3.83)$$

де за означенням:

$$\begin{aligned} \gamma(\beta_j) &= \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} \sqrt{\sigma_k} f_k(z) \frac{V_k(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} dz = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} g_k(\xi) d\xi \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{I_{k_1-1}}^{I_{k_1}} \mathcal{K}_{k, k_1}(z, \xi) \sqrt{\sigma_{k_1}} \frac{V_{k_1}(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} dz = \\ &= \frac{1}{\beta_j^2} \sum_{k=1}^{n+1} \int_{I_{k-1}}^{I_k} g_k(\xi) \sqrt{\sigma_k} \frac{V_k(\xi, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|} d\xi = \sqrt{\sigma_k} \frac{b(\beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|}. \end{aligned} \quad (3.84)$$

З урахуванням (3.84) розклад (3.83) набуде вигляду:

$$f_m(z) \sim \sum_{j=1}^{\infty} \frac{b(\beta_j) V_m(z, \beta_j) \sqrt{\sigma_m}}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|}, \quad m = \overline{1, n+1}. \quad (3.85)$$

Покажемо, що ряд (3.85) є збіжний абсолютно і рівномірно і має своєю сумою $f_m(z)$. Використовуючи критерій Коші рівномірної збіжності функціональних рядів, нерівність Коші-Буняковського, нерівність (3.81) та оцінку збіжності ряду (3.82), отримаємо для оцінки за модулем відрізків ряду:

$$\begin{aligned} \left| \sum_{j_1=j+1}^{j+L} \frac{b_{j_1} V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \sqrt{\sigma_m} \right| &\leq \sum_{j_1=j+1}^{j+L} \frac{|b(\beta_{j_1})| \|V_m(z, \beta_{j_1})\|}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} |\sqrt{\sigma_m}| \leq \left(\sum_{j_1=j+1}^{j+L} b(\beta_{j_1})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \left(\sum_{j_1=j+1}^{j+L} \frac{[V_m(z, \beta_{j_1})]^2}{(\beta_{j_1}^2)^2} \right)^{\frac{1}{2}} |\sqrt{\sigma_m}| \leq \\ &\leq \sqrt{M} \left(\sum_{j_1=j+1}^{\infty} b(\beta_{j_1})^2 \right)^{\frac{1}{2}} \rightarrow 0. \end{aligned} \quad (3.86)$$

Так як оцінки, а відтак і граничне співвідношення (3.86) абсолютні і рівномірні, то згідно із критерієм Коші ряд (3.85) збігається регулярно і його сума є неперервною функцією:

Покажемо, що сума цього ряду є $f_m(z)$, оцінивши в середньому різницю:

$$\begin{aligned} f_m(z) - \sum_{j_1=1}^j \frac{b(\beta_{j_1}) V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} &= \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{K}_{mk}(z, \xi) g_k(\xi) d\xi - \sum_{j_1=1}^{\infty} \frac{V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \left[\sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_k(\xi) \frac{V_k(\xi, \beta_{j_1})}{\|V(z, \beta_{j_1})\|} \sqrt{\sigma_k} d\xi \right] = \\ &= \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \left(\mathcal{K}_{mk}(z, \xi) - \sum_{j_1=1}^j \frac{V_m(\xi, \beta_{j_1}) V_k(\xi, \beta_{j_1})}{\|V(z, \beta_{j_1})\|^2} \sqrt{\sigma_m \sigma_k} g_k(\xi) \right) d\xi = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{K}_{mk}^j(z, \xi) g_k(\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Покажемо, що будь-яке характеристичне число β_{j+i}^2 ($i > 0$) і відповідна йому характеристична вектор-функція $V(z, \beta_{j+i})$ ядра $\mathcal{K}(z, \xi)$ є відповідно характеристичною вектор-функцією і для ядра $\mathcal{K}^j(z, \xi)$, яке також є симетричним.

Розглянемо рівняння:

$$\begin{aligned} \alpha_m(z, \beta_{j+i}) &= \frac{V_m(z, \beta_{j+i})}{\|V(z, \beta_{j+i})\|} \sqrt{\sigma_m} - \beta_{j+i}^2 \sum_{k=1}^m \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{K}_{mk}^j(z, \xi) \frac{V_k(\xi, \beta_{j+i})}{\|V(z, \beta_{j+i})\|} \sqrt{\sigma_k} d\xi = \\ &= \varphi_m(z, \beta_{j+i}) - \beta_{j+i}^2 \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{K}_{mk}^j(x, \xi) \frac{V_k(\xi, \beta_{j+i})}{\|V(z, \beta_{j+i})\|} \sqrt{\sigma_k} d\xi + \beta_{j+i}^2 \sum_{j_1=1}^j \frac{V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \sqrt{\sigma_m} \left(\sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \frac{V_k(\xi, \beta_{j+i}) V_k(\xi, \beta_{j_1})}{\|V(z, \beta_{j_1})\|^2} \sigma_k d\xi \right). \end{aligned}$$

За тотожністю (3.78) і ортогональністю вектор-функцій $V(z, \beta_{j_1}), V(z, \beta_{j+i}); j_1 = \overline{1, j}; j, i > 0$, отримуємо тотожність $\alpha_m(z, \beta_j) = 0$, що потрібно було показати.

Справедливе і зворотне твердження, що будь-яке характеристичне число μ_j^2 ядра $\mathcal{K}^j(z, \xi)$ буде одним із характеристичних чисел β_{j+i}^2 ядра $\mathcal{K}(z, \xi)$, а відповідна цьому числу нетривіальна вектор-функція ψ буде характеристичною функцією обох ядер. Для цього досить розглянути тотожність (враховуючи симетрію ядра $\mathcal{K}^j(z, \xi)$): $\psi_m(z) = \mu^2 \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{K}_{mk}^{j_1}(z, \xi) \psi_k(\xi, \mu) d\xi$, $\mu^2 = \beta_j^2$, $j_1 = \overline{1, j}$, що приводить до тотожності $\psi_m(z) = \mu^2 \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{K}_{mk}(z, \xi) \psi_{kj}(\xi, \mu) d\xi$.

Далі, використовуючи відому квадратичну оцінку $\|\Omega\Theta\| \leq \frac{1}{\tau} \|\Theta\|$, для інтегрального оператора Ω з симетричним ядром, де τ - мінімальне характеристичне число ядра, з (3.87) дістанемо оцінку:

$$\left\| f_m(z) - \sum_{j_1=1}^j \frac{b(\beta_{j_1}) V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \right\| = \left(\sum_{k=1}^{n+1} \left(\int_{l_{k-1}}^{l_k} f_m(z) - \sum_{j_1=1}^j \frac{b(\beta_{j_1}) V_m(z, \beta_{j_1})}{\beta_{j_1}^2 \|V(z, \beta_{j_1})\|} \right)^2 dz \right)^{\frac{1}{2}} =$$

$$= \left(\sum_{k=1}^{n+1} \left(\int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{K}_{mk}^j(z, \xi) g_k(\xi) d\xi \right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \leq \frac{1}{\beta_{j+1}^2} \left(\sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} g_k^2(\xi) d\xi \right)^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{\beta_{j+1}^2} \|g(\xi)\|,$$

де $\beta_{j+1}^2 \in$ мінімальним характеристичним числом ядра $\mathcal{K}^j(z, \xi)$. Згідно теореми про дискретний спектр $\beta_{j+1}^2 \xrightarrow{j \rightarrow \infty} \infty$, а отже ряд (3.85) збігається в середньому до функції $f_m(z)$. Так як цей ряд збігається рівномірно до своєї суми, що є неперервною функцією, то цією сумою є функція $f_m(z)$:

$$f_m(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{b(\beta_j) V_m(z, \beta_j)}{\beta_j^2 \|V(z, \beta_j)\|} = \sum_{j=1}^{\infty} \alpha_j \frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|}, \text{ де } \alpha_j = \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} f_k(z) \sigma_k V_k(z, \beta_j) dz.$$

Отже, встановлюємо рівність

$$f_m(z) = \sum_{j=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{n+1} \int_{l_{k-1}}^{l_k} f_k(\xi) V_k(\xi, \beta_j) \sigma_k d\xi \frac{V_m(z, \beta_j)}{\|V(z, \beta_j)\|_1}, \quad (3.88)$$

що підтверджує регулярну збіжність ряду до $f_m(z)$. Теорема доведена.

Ряд Фур'є (3.77) породжує пряме F_n та обернене F_n^{-1} скінченні інтегральні перетворення Фур'є для обмеженого неоднорідного $n+1$ - складового середовища у випадку, коли спектральний параметр входить в крайові умови і в систему інтерфейсних умов :

$$F_n[f(z)] = \int_{l_0}^l f(z) V(z, \beta_n) \sigma(z) dz \equiv f_n, \quad (3.89)$$

$$F_n^{-1}[f_n] = \sum_{n=1}^{\infty} f_n \frac{V(z, \beta_n)}{\|V(z, \beta_n)\|_1^2} \equiv f(z). \quad (3.90)$$

З метою застосування побудованих інтегральних перетворень для знаходження аналітичних розв'язків розглядуваних математичних моделей масопереносу з урахуванням нестационарності режимів масообміну на масообмінних повернях $z = l_j, j = 0, n$ одержимо основну тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Фур'є

$$L_n = \sum_{i=1}^{n+1} D_i \theta(z - l_{i-1}) \theta(l_i - z) d^2 / dz^2.$$

Теорема 3.2.4 (про основну тотожність): Якщо вектор-функція $f(z) \in C^{(3)}(I_n)$, задовольняє систему інтерфейсних умов (3.52) і крайові умови

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) f_1(z) \Big|_{z=l_0} = f_{10}, \left(\tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} \right) f_{n+1}(z) \Big|_{z=l} = f_{n+1,l}, \quad (3.91)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора ζ_n :

$$F_n[\zeta_n[f(z)]] = -\beta_n^2 f_n - \sum_{i=1}^{n+1} \gamma_i^2 \int_{l_{i-1}}^{l_i} f_i(z) V_i(z, \beta_n) \sigma_i dz + \\ + (\tilde{\alpha}_{22}^{n+1})^{-1} V_{n+1}(l, \beta_n) f_{n+1,l} - D_1 \sigma_1 (\tilde{\alpha}_{11}^0)^{-1} \cdot V_1(l, \beta_n) f_{10} \quad (3.92)$$

Доведення: Виходячи із системи інтерфейсних умов встановлюємо базову тотожність

$$\left[f_k(z) V'_k(z, \beta_n) - f'_k(z) V_k(z, \beta_n) \right] \Big|_{z=l_k} = \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} \left[f_{k+1}(z) V'_{k+1}(z, \beta_n) - f'_{k+1}(z) V_{k+1}(z, \beta_n) \right] \Big|_{z=l_k} = \overline{1, n} \quad (3.93)$$

Якщо в лівій частині (3.91) проінтегрувати два рази частинами, то позаінтегральні члени в точках $z=l_k$ внаслідок вибору σ_k та базової тотожності (3.93) перетворюються в нуль. Доданки в точках $z=l_0$ та $z=l \equiv l_{n+1}$ перетворюються стандартним способом. Вислідом усього цього є рівність:

$$F_n[\zeta_n[f(z)]] \equiv \sum_{i=1}^{n+1} \int_{l_{i-1}}^{l_i} D_i \frac{d^2 f_i}{dz^2} V_i(z, \beta_n) \sigma_i dz = \\ = \sum_{i=1}^{n+1} \gamma_i^2 \sigma_i D_i \left(\frac{df_i}{dz} V_i(z, \beta_n) - f_i(z) \frac{d}{dz} V_i(z, \beta_n) \right) \Big|_{z=l_{i-1}}^{z=l_i} + \sum_{i=1}^{n+1} \int_{l_{i-1}}^{l_i} f_i \left(D_i \frac{d^2 f_i}{dz^2} V_i \right) \sigma_i dz = \\ = -\sigma_1 D_1 \left[f'_1(z) V_1(z, \beta_n) - f_1(z) V'_1(z, \beta_n) \right] \Big|_{z=l_0} + \left[f'_{n+1}(z) V_{n+1}(z, \beta_n) - f_{n+1}(z) V'_{n+1}(z, \beta_n) \right] \Big|_{z=l} + \\ + \sum_{i=1}^{n+1} \int_{l_{i-1}}^{l_i} f_i(z) \left[-D_i \frac{\beta_n^2 + \gamma_i^2}{D_i} V_i \right] \sigma_i dz \quad (3.94)$$

Розклавши суму на два доданки та перетворивши позаінтегральні члени стандартним способом, одержуємо тотожність (3.92).

Якщо система інтерфейсних умов є неоднорідною, тобто

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) g_k(z) - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) g_{k+1}(z) \right]_{z=l_k} = \psi_{jk}, \quad (3.95)$$

то базова тотожність (3.93) набуває вигляду :

$$\begin{aligned} \left[g'_k(z) V_k(z, \beta_j) - g_k(z) V'_k(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} &= \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} \left[g'_{k+1}(z) V_{k+1}(z, \beta_j) - g_{k+1}(z) V'_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} + \\ &+ \frac{1}{c_{11,k}} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} \psi_{2k} - \left[\left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} \psi_{1k} \end{aligned} \quad (3.96)$$

Внаслідок рівностей

$$\begin{aligned} (\alpha_{11}^0)^{-1} V_1(l_0, \beta_j) &= (\alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0 - \delta_{11}^0 \beta_{11}^0)^{-1} \left[\delta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right], \\ (\tilde{\alpha}_{22}^{n+1})^{-1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) &= (\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1})^{-1} \left[\delta_{22}^{n+1} V'_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) \right] \end{aligned}$$

та базової тотожності (3.93) основна тотожність (3.92) має структуру:

$$\begin{aligned} F_n \left[L_n \left[g(z) \right] \right] &= -\beta_n^2 g_n - \sum_{i=1}^{n+1} \gamma_i^2 \int_{l_{i-1}}^{l_i} g_i(z) V_i(z, \beta_j) \sigma_i dz + \\ &\frac{\alpha_{11}^2 \sigma_1}{\delta_{11}^0 \beta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0} \left(\delta_{11}^0 V'_1(l_0, \beta_j) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_j) \right) g_{10} + \frac{D_{n+1} \sigma_{n+1}}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1}} \times \\ &\times \left[\delta_{22}^{n+1} V'_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_j) \right] g_{n+1,l} + \sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k^2 \sigma_k}{c_{11,k}} \times \\ &\times \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} \psi_{2k} - \left[\left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_j) \right]_{z=l_k} \psi_{1k} \end{aligned} \quad (3.97)$$

Логічну схему застосування запроваджених скінченних інтегральних перетворень Фур'є F_n та F_n^{-1} продемонструємо на окремих математичних моделях масопереносу для неоднорідних середовищ.

Квазистатична модель: Побудувати обмежений в області $\mathcal{D}_n = \{(t, z) : t \geq 0; z \in I_n\}$ розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку параболічного типу, що описує дифузійний масоперенос (молекулярний транспорт) в обмеженому $(n+1)$ -складовому неоднорідному середовищі з врахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів (концентрацій) переносу на масообмінних поверхнях $z = l_j, j = \overline{0, n+1}$

$$\frac{\partial u_m}{\partial t} + \chi_m^2 u_m - D_m \frac{\partial^2 u_m}{\partial z^2} = f_m(t, z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (3.98)$$

за початковими умовами

$$u_m(t, z)|_{t=0} = g_m(z), z \in (l_{m-1}, l_m), m = \overline{1, n+1} \quad (3.99)$$

крайовими умовами

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_1(t, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_0(t) \quad (3.100)$$

$$\left[\left(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{n+1}(t, z) \Big|_{z=l} = \omega_l(t)$$

та системою n - інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1}(t, z) - \left[\left(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1}(t, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = \omega_{jk}(t); \quad (3.101)$$

$j=1, 2; k=\overline{1, n}$

Запишемо (3.98) і початкові умови (3.99) у матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi_1^2 - D_1 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_1 \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi_2^2 - D_2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_2 \\ \dots \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \chi_{n+1}^2 - D_{n+1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, z) \\ f_2(t, z) \\ \dots \\ f_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} \quad (3.102)$$

$$\begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_1(t, z) \\ g_2(t, z) \\ \dots \\ g_{n+1}(t, z) \end{bmatrix}$$

Інтегральний оператор F_n зобразимо у вигляді операторної матриці-рядка:

$$F_n[\dots] = \left[\int_{l_0}^{l_1} \dots V_1(z, \beta_m) \sigma_1 dz \int_{l_1}^{l_2} \dots V_2(z, \beta_m) \sigma_2 dz \dots \int_{l_{n-1}}^{l_n} \dots V_n(z, \beta_m) \sigma_n dz \int_{l_n}^{l_{n+1}} \dots V_{n+1}(z, \beta_m) \sigma_{n+1} dz \right]. \quad (3.103)$$

В припущенні, що $\max \{z_1^2; z_2^2; \dots; z_n^2; z_{n+1}^2\} = z_{n+1}^2$, Покладемо $\gamma_i^2 = \chi_{n+1}^2 - \chi_i^2 \geq 0, i=\overline{1, n}$.

Застосуємо за правилом множення матриць операторну матрицю-рядок (3.103) до задачі (3.102). Внаслідок тотожності (3.97) одержуємо задачу Коші:

$$\left[\frac{d}{dt} + (\beta_m^2 + z_{n+1}^2) \right] u_m(t) = \mathcal{F}_m(t); u_m(t) \Big|_{t=0} = g_m. \quad (3.104)$$

Тут:

$$u_m(t) = \sum_{j=1}^{n+1} u_{jm}(t); u_{jm}(t) = \int_{l_{j-1}}^{l_j} u_j(t, z) V_j(z, \beta_m) \sigma_j dz;$$

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_m(t) &= f_m(t) + \frac{\alpha_1^2 \sigma_1}{\delta_{11}^0 \beta_{11}^0 - \alpha_{11}^0 \gamma_{11}^0} \left[\delta_{11}^0 V_1'(l_0, \beta_m) + \gamma_{11}^0 V_1(l_0, \beta_m) \right] \omega_0(t) + \\ &+ \left(\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \delta_{22}^{n+1} \beta_{22}^{n+1} \right)^{-1} \left[\delta_{22}^{n+1} V_{n+1}'(l_{n+1}, \beta_m) + \gamma_{22}^{n+1} V_{n+1}(l_{n+1}, \beta_m) \right] \omega_l(t) + \\ &+ \sum_{k=1}^n \frac{\alpha_k^2 \sigma_k}{c_{11,k}} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_m) \right]_{z=l_k} \bar{\omega}_{2k} - \left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{k+1}(z, \beta_m) \Big|_{z=l_k} \bar{\omega}_{1k}(t) \Big], \\ f_m(t) &= \sum_{i=1}^{n+1} f_{jm}(t), g_m = \sum_{i=1}^{n+1} g_{jm}(z), \end{aligned}$$

Розв'язком задачі Коші (3.104) є функція

$$u_m(t) = e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} g_m + \int_0^t e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)(t-\tau)} \mathcal{F}_m(\tau) d\tau \quad (3.105)$$

Інтегральний оператор F_n^{-1} як обернений до F_n зобразимо у вигляді операторної матриці-стовпця:

$$F_n^{-1}[\dots] = \begin{bmatrix} \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_1(z, \beta_m) (\|V(z, \beta_m)\|_1^2)^{-1} \\ \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_2(z, \beta_m) (\|V(z, \beta_m)\|_1^2)^{-1} \\ \vdots \\ \sum_{m=1}^{\infty} \dots V_{n+1}(z, \beta_m) (\|V(z, \beta_m)\|_1^2)^{-1} \end{bmatrix} \quad (3.106)$$

Якщо тепер застосувати за правилом множення матриць операторну матрицю-стовпець (3.106) до матриці-елемента $[u_m(t)]$, де функція $u_m(t)$ визначена формулою (3.105), то після елементарних перетворень отримуємо компоненти

$$\begin{aligned}
u_j(t, z) = & \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{H}_{jk}(t-\tau, z, \xi) [f_k(\tau, \xi) - g_k(\xi) \delta_+(\tau)] \sigma_k d\xi d\tau + \\
& + \int_0^t [W_{0j}(t-\tau, z) \omega_0(\tau) + W_{lj}(t-\tau, z) \omega_l(\tau)] d\tau + \\
& + \sum_{k=1}^n \int_0^t [\mathcal{R}_{jk}^{(1)}(t-\tau, z) \omega_{1k}(\tau) + \mathcal{H}_{jk}^{(2)}(t-\tau, z) \omega_{2k}(\tau)] d\tau, j = \overline{1, n+1}
\end{aligned} \tag{3.107}$$

вектор-функції $u(t, z) = \{u_1(t, z); u_2(t, z); \dots; u_n(t, z); u_{n+1}(t, z)\}$, яка повністю визначає єдиний розв'язок крайової задачі (3.98)-(3.101).

Тут головні розв'язки задачі :

- матриця функцій впливу, породжених неоднорідністю системи (3.107) :

$$\mathcal{H}_{jk}(t, z, \xi) = \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{V_j(z, \beta_m) V_k(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j, k = 1, \overline{n+1},$$

- вектор-функції Гріна, породжені крайовими умовами на межах $z = l_0$ та $z = l \equiv l_{n+1}$:

$$W_{0j}(t, z) = -D_1 \sigma_1 \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{V_1(l_0, \beta_m) V_j(z, \beta_m)}{[\alpha_{11}^0 - \sigma_{11}^0 (\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)] \|V(z, \beta_m)\|_1^2};$$

$$W_{lj}(t, z) = \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{V_j(z, \beta_m) V_{n+1}(l, \beta_m)}{[\alpha_{22}^{n+1} - \sigma_{22}^{n+1} (\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)] \|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j = 1, \overline{n+1},$$

=матриця функцій Гріна, породжених системою інтерфейсних умов $z = l_k$.

$$\mathcal{R}_{jk}^{(1)}(t, z) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{\tilde{\alpha}_{22}^k V'_{k+1}(l_k, \beta_m) + \tilde{\beta}_{22}^k V_{k+1}(l_k, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_j(z, \beta_m)$$

$$\mathcal{R}_{jk}^{(2)}(t, z) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-(\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)t} \frac{\tilde{\alpha}_{12}^k V'_{k+1}(l_k, \beta_m) + \tilde{\beta}_{12}^k V_{k+1}(l_k, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_j(z, \beta_m).$$

Розв'язок (3.107) розглядуваної крайової задачі ми отримали при умові, що

$$\psi_1 = \delta_{11}^0 g_1'(l_0) + \gamma_{11}^0 g_1(l_0) = 0, \psi_{n+1} = \delta_{22}^{n+1} g_{n+1}'(l_{n+1}) + \gamma_{22}^{n+1} g_{n+1}(l_{n+1}) = 0,$$

$$\psi_{jk} = \delta_{j1}^k g_k'(l_k) + \gamma_{j1}^k g_k(l_k) - \delta_{j2}^k g_{k+1}'(l_k) + \gamma_{j2}^k g_{k+1}(l_k) = 0.$$

У протилежному випадку у розв'язку (3.107) функції $\omega_0(\tau), \omega_l(\tau), \omega_{jk}(\tau)$ треба замінити відповідно до функції $(\omega_0(\tau) + \psi_1 \delta_+(\tau)), (\omega_l(\tau) + \psi_{n+1} \delta_+(\tau)), (\omega_{jk}(\tau) + \psi_{jk} \delta_+(\tau))$.

Це означає, що в формулі (3.107) з'являться ще доданки

$$W_{0j}(t, z) \psi_1 + W_{lj}(t, z) \psi_{n+1} + \sum_{k=1}^n [\mathcal{R}_{jk}^{(1)}(t, z) \psi_{1k} + \mathcal{R}_{jk}^{(2)}(t, z) \psi_{2k}].$$

Динамічна модель: Побудувати обмежений в області D_n розв'язок системи диференціальних рівнянь з частинними похідними 2-го порядку гіперболічного типу для обмеженого $(n+1)$ -складового неоднорідного середовища з врахуванням динаміки зміни швидкостей градієнтів визначальних параметрів переносу на краях та масообмінних поверхнях $z = l_j, j = 0, n$:

$$\frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} + \chi_j^2 u_j - D_j \frac{\partial^2 u_j}{\partial z^2} = f_j(t, z), z \in (l_{j-1}, l_j), j = \overline{1, n+1} \quad (3.108)$$

за початковими умовами

$$u_j(t, z)|_{t=0} = g_{1j}(z), \frac{\partial u_j}{\partial t} \Big|_{t=0} = g_{2j}(z), j = \overline{1, n+1} \quad (3.109)$$

крайовими умовами

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_1(t, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_0(t)$$

$$\left[\left(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_{n+1}(t, z) \Big|_{z=l} = \omega_l(t)$$
(3.110)

та системою інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_{k+1}(t, z) - \left[\left(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_{k+1}(t, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = \omega_{jk}(t);$$

$$j=1, 2; k=\overline{1, n}$$
(3.111)

Запишемо систему (3.108) і початкові умови (3.111) у матричній формі :

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_1^2 - D_1 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_1(t, z) \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_2^2 - D_2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_2(t, z) \\ \dots\dots\dots \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_{n+1}^2 - D_{n+1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, z) \\ f_2(t, z) \\ \dots\dots\dots \\ f_{n+1}(t, z) \end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots\dots\dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_{11}(z) \\ g_{12}(z) \\ \dots\dots\dots \\ g_{1, n+1}(z) \end{bmatrix}, \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots\dots\dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_{21}(z) \\ g_{22}(z) \\ \dots\dots\dots \\ g_{2, n+1}(z) \end{bmatrix}$$
(3.112)

В припущенні, що $\max \{ \chi_1^2; \chi_2^2; \dots; \chi_n^2; \chi_{n+1}^2 \} = \chi_{n+1}^2$, застосуємо до задачі (3.112) за правилом множення матриць операторну матрицю - рядок (3.103). Внаслідок тотожності (3.97) одержуємо задачу Коші:

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + (\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2) \right] u_m(t) = \mathcal{F}_m(t); u_m(t) \Big|_{t=0} = g_{1m}, \frac{d}{dt} u_m(t) \Big|_{t=0} = g_{2m}.$$
(3.113)

Розв'язком задачі Коші (3.113) є функція

$$u_m(t) = \frac{\sin q_m t}{q_m} g_{2m} + \frac{d}{dt} \frac{\sin q_m t}{q_m} g_{1m} + \int_0^t \frac{\sin q_m(t-\tau)}{q_m} \mathcal{F}_m(\tau) d\tau, q_m = (\beta_m^2 + \chi_{n+1}^2)^{1/2}.$$
(3.114)

Застосувавши до матриці-елемента $[u_m(t)]$, визначеної формулою (3.114, за правилом множення матриць операторну матрицю-стовпець (3.106), після елементарних перетворень одержуємо єдиний розв'язок гіперболічної задачі (3.108)-(3.111):

$$\begin{aligned}
u_j(t, z) = & \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{H}_{jk}(t-\tau, z, \xi) [f_k(\tau, \xi) + g_{2k}(\xi) \delta_+(\tau)] \sigma_k d\xi d\tau + \\
& + \sum_{k=1}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{H}_{jk}(t, z, \xi) g_{1k}(\xi) \sigma_k d\xi + \\
& + \int_0^t [W_{0j}(t-\tau, z) \omega_0(\tau) + W_{lj}(t-\tau, z) \omega_l(\tau)] d\tau + \\
& + \sum_{k=1}^n \int_0^t [\mathcal{R}_{jk}^{(1)}(t-\tau, z) \omega_{1k}(\tau) + \mathcal{R}_{jk}^{(2)}(t-\tau, z) \omega_{2k}(\tau)] d\tau, j = \overline{1, n+1}
\end{aligned} \tag{3.115}$$

Тут головні розв'язки гіперболічної задачі (3.108)-(3.111):

- матриця функцій впливу, породжених неоднорідністю системи (3.108)):

$$\mathcal{H}_{jk}(t, z, \xi) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{V_j(z, \beta_m) V_k(\xi, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j, k = \overline{1, n+1}$$

- вектор-функції Гріна, породжених крайовими умовами на межах $z = l_0$ та $z = l$:

$$W_{0j}(t, z) = -a_1^2 \sigma_1 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{V_1(l_0, \beta_m) V_j(z, \beta_m)}{\tilde{\alpha}_{11}^0 \|V(z, \beta_m)\|_1^2}; W_{lj}(t, z) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{V_j(z, \beta_m) V_{n+1}(l, \beta_m)}{\tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \|V(z, \beta_m)\|_1^2}; j = \overline{1, n+1}$$

- та матриці функції Гріна, породжених неоднорідністю системи інтерфейсних умов:

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}_{jk}^{(1)}(t, z) = & - \frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{\tilde{\alpha}_{22}^k V'_{k+1}(l_k, \beta_m) + \tilde{\beta}_{22}^k V_{k+1}(l_k, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_j(z, \beta_m), \\
\mathcal{R}_{jk}^{(2)}(t, z) = & \frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\sin q_m t}{q_m} \frac{\tilde{\alpha}_{12}^k V'_{k+1}(l_k, \beta_m) + \tilde{\beta}_{12}^k V_{k+1}(l_k, \beta_m)}{\|V(z, \beta_m)\|_1^2} V_j(z, \beta_m)
\end{aligned}$$

Розв'язок даної гіперболічної крайової задачі побудовано при умові, що

$$\psi_{1i} \equiv \delta_{11}^0 g'_1(l_0) + \gamma_{11}^0 g_{i1}(l_0) = 0, \psi_{n+1,i} \equiv \delta_{22}^{n+1} g'_{i,n+1}(l_{n+1}) + \gamma_{22}^{n+1} g_{i,n+1}(l_{n+1}) = 0,$$

$$\psi_{jk,i}^0 = \delta_{j1}^k g'_{ik}(l_k) + \gamma_{j1}^k g_{ik}(l_k) - \delta_{j2}^k g'_{i,k+1}(l_k) + \gamma_{j2}^k g_{i,k+1}(l_k) = 0, i = 1, 2$$

У протилежному випадку у формулі (3.115) появляються складові

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial^2}{\partial t^2} W_{0j}(t, x) \psi_{11} + W_{0j}(t, x) \psi_{12} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} W_{lj}(t, x) \psi_{n+1,1} + W_{lj}(t, x) \psi_{n+1,1} + \\
& + \sum_{k=1}^n \left\{ \left[\frac{\partial^2}{\partial t^2} R_{jk}^{(1)}(t, x) \psi_{1k,1} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} R_{jk}^{(2)}(t, x) \psi_{2k,1} \right] + \left[R_{jk}^{(1)}(t, x) \psi_{1k,2} + R_{jk}^{(2)}(t, x) \psi_{2k,2} \right] \right\}.
\end{aligned}$$

3.3. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для напівобмежених неоднорідних n-складових середовищ переносу

Запровадимо інтегральне перетворення, породжене на множині

$$I_n^t = \left\{ z : z \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (l_{j-1}, l_j); l_0 \geq 0, l_{n+1} = \infty \right\} \text{ диференціальним оператором Фур'є другого}$$

порядку

$$L_n = \left[\sum_{k=1}^n D_k \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z) + D_{n+1} \theta(z - l_n) \right] \frac{d^2}{dz^2} \quad (3.109)$$

у припущенні, що для будь-якої вектор функції $g(z) = \{g_1(z), g_2(z), \dots, g_n(z), g_{n+1}(z)\}$ із області визначення оператора L_n справджуються крайові умови

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) g_1(z) \Big|_{z=l_0} = 0, \quad \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{d^m g_{n+1}}{dz^m} = 0, \quad m = 0, 1 \quad (3.110)$$

та системи інтерфейсних умов

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) g_k - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) g_{k+1} \right] \Big|_{z=l_k} = 0; \quad j = 1, 2; \quad k = \overline{1, n} \quad (3.111)$$

Розглянемо задачу про конструкцію обмеженого в області $D_n^+ = \{ (t, z) : t \in (0, \infty), z \in I_n^+ \}$ розв'язку системи диференціальних рівнянь масопереносу з частинними похідними параболічного типу [30]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_j^2 - D_j \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u_j(t, x) = 0, \quad z \in (l_{j-1}, l_j), j = \overline{1, n}, l_{n+1} = \infty \quad (3.112)$$

за початковими умовами

$$u_j(t, z) \Big|_{t=0} = g_j(z), \quad z \in (l_{j-1}, l_j), j = \overline{1, n} \quad (3.113)$$

та крайовими умовами

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_1 \Big|_{z=l_0} = 0; \quad \frac{\partial u_{n+1}}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (3.114)$$

та системою інтерфейсних умов

$$\begin{aligned} \left(L_{j1}^k [u_k] - L_{j2}^k [u_{k+1}] \right) \Big|_{z=l_k} &\equiv \left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right] u_k(t, z) - \right. \\ &\left. - \left[\left(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1}(t, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = 0; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = 1, 2 \end{aligned} \quad (3.115)$$

Припустимо, що вектор-функція $u(t, z) = \{u_1(t, z), u_2(t, z), \dots, u_{n+1}(t, z)\}$ є оригіналом за Лапласом стосовно t [29]. У зображенні за Лапласом задачі (3.112)-(3.115) відповідає задача побудови обмеженого на множині I_1^+ розв'язку сепараторної системи звичайних диференціальних рівнянь Фур'є другого порядку для модифікованих функцій

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - q_j^2\right)u_j^*(p, z) = -\bar{g}_j(z); j = \overline{1, n+1} \quad \text{і} \quad (3.116)$$

за крайовими умовами

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^0\right)u_1^* \Big|_{z=l_0} = g_0, \frac{du_{n+1}^*}{dz} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (3.117)$$

та системою інтерфейс них умов

$$\left[\left(\alpha_{j1}^{-1} \frac{d}{dx} + \beta_{j1}^{-1}\right)u_1^*(p, x) - \left(\alpha_{j2}^{-1} \frac{d}{dx} + \beta_{j2}^{-1}\right)u_2^*(p, x)\right]_{x=l_1} = \psi_{j1}, j = 1, 2 \quad (3.118)$$

Тут

$$\bar{g}_j = D_j^{-1} g_j(z); q_j = D_j^{-1/2} \left(p + \gamma_j^2\right)^{\frac{1}{2}}, D_j > 0, \gamma_j^2 \geq 0, \text{Req}_j > 0;$$

$$\bar{\alpha}_{ji}^m = \alpha_{ji}^m + \delta_{ji}^m p, \bar{\beta}_{ji}^m = \beta_{jk}^m + \gamma_{jk}^m p; m = \overline{0, n}; j, k = 1, 2;$$

$$g_0 = \delta_{11}^0 g'_1(l_0) + \gamma_{11}^0 g_1(l_0); \psi_{jk} = \delta_{j1}^k q'_k(l_k) + \gamma_{j1}^k g_k(l_k) - \left(\delta_{j2}^k g'_{k+1}(l_k) + \gamma_{j1}^k q_k(l_k)\right), j = 1, 2.$$

Заміною змінних задача (3.116)-(3.118) легко зводиться до задачі з однорідними крайовими умовами ($g_0 = 0$) і однорідною системою інтерфейс них умов ($\psi_{j1} = 0; j = \overline{1, n}$). і

Фундаментальну систему розв'язків для диференціального рівняння Фур'є

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - q^2\right)V = 0 \quad \text{утворюють функції } \exp(qz) \quad \text{та } \exp(-qz) \quad \text{або їх лінійні}$$

комбінації $V_1 = ch(qz)$ та $V_2 = sh(qz)$.

Зафіксувавши гілку $\text{Re } q_k(p) > 0$, розв'язок неоднорідної крайової задачі (3.116)-(3.118) побудуємо методом функцій Коші [29]:

$$u_k^*(p, z) = A_k \cdot ch q_k z + B_k \cdot sh q_k z + \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) \mathcal{F}_k^*(p, \xi) d\xi; k = \overline{1, n}; \quad (3.119)$$

$$u_{n+1}^*(p, z) = B_{n+1} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} + \int_{l_n}^{\infty} \mathcal{E}_{n+1}^*(p, z, \xi) \mathcal{F}_{n+1}^*(p, \xi) d\xi; \quad (3.120)$$

де $\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi), k = \overline{1, n+1}$ - функції Коші, що задовольняють умови:

$$\begin{cases} \mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = 0 \\ \frac{d}{dz} \mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \frac{d}{dz} \mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} = -1 \end{cases}. \quad (3.121)$$

Функції Коші $\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi), k = \overline{1, n}$ шукаємо у вигляді :

$$\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) = \begin{cases} \mathcal{E}_k^{-*} = D_{1_k} chq_k z + E_{1_k} shq_k z; l_k < z < \xi < l_{k+1} \\ \mathcal{E}_k^{+*} = D_{2_k} chq_k z + E_{2_k} shq_k z; l_k < \xi < z < l_{k+1} \end{cases}, \quad (3.122)$$

що задовольняють ще додаткові однорідні умови :і

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{12}^k \right) \mathcal{E}_k^* \Big|_{z=l_{k-1}+0} = 0; \left(\bar{\alpha}_{11}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^k \right) \mathcal{E}_k^{+*} \Big|_{z=l_k-0} = 0, k = \overline{1, n}. \quad (3.123)$$

Функцію Коші $\mathcal{E}_{n+1}^*(p, z, \xi)$ шукаємо у вигляді

$$\mathcal{E}_{n+1}^*(p, z, \xi) = \begin{cases} \mathcal{E}_{n+1}^{-*} = D_{1_{n+1}} chq_{n+1} z + E_{1_{n+1}} shq_{n+1} z; l_n < z < \xi < \infty \\ \mathcal{E}_{n+1}^{+*} = E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(z-l_n)}; l_n < \xi < z < \infty \end{cases}, \quad (3.124)$$

що задовольняє додаткову умову

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^n \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{12}^n \right) \mathcal{E}_{n+1}^* \Big|_{z=l_n+0} = 0. \quad (3.125)$$

Знаходимо функції Коші $\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi); k = \overline{1, n}$. З умови (3.121) отримаємо :

$$\left[\mathcal{E}_k^{+*}(p, z, \xi) - \mathcal{E}_k^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=l_k} = (D_{2_k} - D_{1_k}) chq_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) shq_k \xi = 0$$

$$\frac{1}{q_k} \frac{d}{dz} \left[\mathcal{E}_k^{+*}(p, z, \xi) - \mathcal{E}_k^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=l_k} = (D_{2_k} - D_{1_k}) shq_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) chq_k \xi = -\frac{1}{q_k}$$

Отже, відносно $(D_{2_k} - D_{1_k})$ та $(E_{2_k} - E_{1_k})$ отримуємо алгебраїчну систему :

$$(D_{2_k} - D_{1_k}) chq_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) shq_k \xi = 0;$$

$$(D_{2_k} - D_{1_k}) shq_k \xi + (E_{2_k} - E_{1_k}) chq_k \xi = -\frac{1}{q_k}. \quad (3.126)$$

Звідси одержуємо співвідношення :

$$(D_{2_k} - D_{1_k}) = \frac{1}{q_k} shq_k \xi; (E_{2_k} - E_{1_k}) = -\frac{1}{q_k} chq_k \xi. \quad (3.127)$$

З інтерфейсних умов (3.123) маємо рівності:

$$\begin{aligned} \left(\bar{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{12}^k \right) \mathcal{E}_k^{-*} \Big|_{z=l_{k-1}} &= D_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) + E_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) = 0 \\ \left(\bar{\alpha}_{11}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^k \right) \mathcal{E}_k^{+*} \Big|_{z=l_k} &= D_{2_k} \cdot V_{11}^{k1}(q_k l_k) + E_{2_k} \cdot V_{11}^{k2}(q_k l_k) = 0 \end{aligned} \quad (3.128)$$

Підставивши в перше рівняння системи (3.128) значення D_{2_k}, E_{2_k} , із співвідношень (3.127), отримуємо систему рівнянь для визначення невідомих коефіцієнтів D_{1_k}, E_{1_k} :

$$\begin{aligned} D_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_k) + E_{1_k} \cdot V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) &= 0 \\ D_{1_k} \cdot V_{11}^{k1}(q_k l_k) + E_{1_k} \cdot V_{11}^{k2}(q_k l_k) &= \frac{1}{q_k} \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi). \end{aligned}$$

Звідси знаходимо:

$$\begin{aligned} D_{1_k} &= \frac{\begin{vmatrix} 0 & V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ \frac{1}{q_k} \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) & V_{11}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ V_{11}^{k1}(q_k l_k) & V_{11}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix}} = - \frac{\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi)}{q_k \cdot \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ E_{1_k} &= \frac{\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1})}{q_k \cdot \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)}. \end{aligned}$$

Цим функція Коші $\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi); k = \overline{1, n}$ визначена і внаслідок симетрії відносно діагоналі $z = \xi$ має таку структуру:

$$\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) = - \frac{1}{q_k \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \begin{cases} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi), & l_{k-1} < z < \xi < l_k \\ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \cdot \Phi_{11}^n(q_k l_k, q_k z), & l_{k-1} < \xi < z < l_k \end{cases}. \quad (3.129)$$

Тут

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = \begin{cases} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) V_{11}^{k2}(q_k l_k) - V_{11}^{k1}(q_k l_k) V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}); & k = \overline{2, n} \\ \Delta_{11}^1(q_1 l_0, q_1 l_1); & k = 1 \end{cases}$$

$$\Delta_{j1}^1(q_1 l_0, q_1 l_1) = V_{11}^{01}(q_1 l_0) \cdot V_{j1}^{12}(q_1 l_1) - V_{j1}^{11}(q_1 l_1) \cdot V_{11}^{0,2}(q_1 l_0)$$

Обчислимо вираз для функції Коші $\mathcal{E}_{n+1}^*(p, z, \xi)$. З умови (3.125) знаходимо додаткове рівняння:

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^n \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{12}^n \right) \mathcal{E}_{n+1}^{-*}(p, z, \xi) \Big|_{z=l_n} = D_{1_{n+1}} V_{12}^{n1}(q_{n+1} l_n) + E_{1_{n+1}} V_{12}^{n2}(q_{n+1} l_n) = 0. \quad (3.130)$$

Внаслідок умов (3.121) отримуємо алгебраїчну систему :

$$\left[\mathcal{E}_{n+1}^{+*}(p, z, \xi) - \mathcal{E}_{n+1}^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=\xi} = E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} - \left(D_{1_{n+1}} \cdot chq_{n+1}\xi + E_{1_{n+1}} \cdot shq_{n+1}\xi \right) = 0. \quad (3.131)$$

$$\frac{d}{dz} \left[\mathcal{E}_{n+1}^{+*}(p, z, \xi) - \mathcal{E}_{n+1}^{-*}(p, z, \xi) \right] \Big|_{z=\xi} = -q_{n+1} E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} - q_{n+1} \left(D_{1_{n+1}} shq_{n+1}\xi + E_{1_{n+1}} chq_{n+1}\xi \right) = -1.$$

Із системи (3.130) отримуємо:

$$D_{1_{n+1}} = \frac{\begin{vmatrix} E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} & shq_{n+1}\xi \\ \frac{1}{q_{n+1}} - E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} & chq_{n+1}\xi \end{vmatrix}}{ch^2 q_{n+1}\xi - sh^2 q_{n+1}\xi} = -\frac{shq_{n+1}\xi}{q_{n+1}} + E_{2_{n+1}} e^{q_{n+1}l_n} \left[ch^2 q_{n+1}\xi - sh^2 q_{n+1}\xi \right] = -\frac{shq_{n+1}\xi}{q_{n+1}} + E_{2_{n+1}} e^{q_{n+1}l_n};$$

$$E_{1_{n+1}} = \frac{\begin{vmatrix} chq_{n+1}\xi & D_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} \\ shq_{n+1}\xi & \frac{1}{q_{n+1}} - E_{2_{n+1}} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} \end{vmatrix}}{ch^2 q_{n+1}\xi - sh^2 q_{n+1}\xi} = \frac{chq_{n+1}\xi}{q_{n+1}} - E_{2_{n+1}} e^{q_{n+1}l_n}.$$

Підставивши $D_{1_{n+1}}, E_{1_{n+1}}$ в (3.130), одержуємо:

$$E_{2_{n+1}} = -\frac{1}{q_{n+1}} \left[V_{12}^{n2}(q_{n+1} l_n) chq_{n+1}\xi - V_{12}^{n1}(q_{n+1} l_n) shq_{n+1}\xi \right] \frac{e^{-q_{n+1}l_n}}{V_{12}^{n1}(q_{n+1}\xi) - V_{12}^{n2}(q_{n+1}\xi)} = \frac{\Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1}\xi)}{q_{n+1} \cdot (\bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{12}^n)}.$$

Тут

$$\begin{aligned} V_{12}^{n1}(q_{n+1}\xi) - V_{12}^{n2}(q_{n+1}\xi) &= \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} shq_{n+1} l_n + \bar{\beta}_{12}^n chq_{n+1} l_n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} chq_{n+1} l_n - \bar{\beta}_{12}^n shq_{n+1} l_n = \\ &= (\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1}) (chq_{n+1} l_n - shq_{n+1} l_n) = (\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1}) e^{-q_{n+1}l_n}. \end{aligned}$$

Цим функція Коші $\mathcal{E}_{n+1}^*(p, z, \xi)$ визначена і внаслідок симетрії відносно діагоналі $z = \xi$ має таку структуру:

$$\mathcal{E}_{n+1}^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_{n+1} (\bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{12}^n)} \begin{cases} \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \cdot e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}, l_n < z < \xi < \infty \\ \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} \xi) \cdot e^{-q_{n+1}(z-l_n)}, l_n < \xi < z < \infty \end{cases}. \quad (3.132)$$

В результаті розв'язання відповідних систем алгебраїчних рівнянь для знаходження невідомих $D_{i_k}, E_{i_k}, E_{i_{n+1}}; k = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}$, функції Коші будуть визначені і внаслідок симетрії відносно діагоналі $z = \xi$ матимуть структуру:

$$\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi) = -\frac{1}{q_k \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \begin{cases} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi), l_{k-1} < z < \xi < l_k, \\ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \cdot \Phi_{11}^n(q_k l_k, q_k z), l_{k-1} < \xi < z < l_k \end{cases}, \quad k = \overline{1, n}$$

$$\mathcal{E}_{n+1}^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_{n+1}(\bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{12}^n)} \begin{cases} \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \cdot e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}, l_n < z < \xi < \infty \\ \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} \xi) \cdot e^{-q_{n+1}(z - l_n)}, l_n < \xi < z < \infty \end{cases}. \quad (3.133)$$

Тут :

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = \begin{cases} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) V_{11}^{k,2}(q_k l_k) - V_{11}^{k,1}(q_k l_k) V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}); & k = \overline{2, n} \\ \Delta_{11}^1(q_1 l_0, q_1 l_1); & k = 1 \end{cases}$$

$$\Delta_{j1}^1(q_1 l_0, q_1 l_1) = V_{11}^{01}(q_1 l_0) \cdot V_{j1}^{12}(q_1 l_1) - V_{j1}^{11}(q_1 l_1) \cdot V_{11}^{0,2}(q_1 l_0)$$

$$V_{ij}^{k1}(q_s l_k) = (\bar{\alpha}_{ij}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{ij}^k) ch q_s z \Big|_{z=l_k} = \bar{\alpha}_{ij}^k q_s sh q_s l_k + \bar{\beta}_{ij}^k ch q_s l_k$$

$$V_{ij}^{k2}(q_s l_k) = (\bar{\alpha}_{ij}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{ij}^k) sh q_s z \Big|_{z=l_k} = \bar{\alpha}_{ij}^k q_s ch q_s l_k + \bar{\beta}_{ij}^k sh q_s l_k;$$

$$\Phi_{ij}^k(q_s l_k, q_s z) = V_{ij}^{k2}(q_s l_k) ch q_s z - V_{ij}^{k1}(q_s l_k) sh q_s z.$$

При відомих функціях Коші $\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi)$ крайова умова в точці $z = l_0$ та умови інтерфейсу (7) для визначення невідомих коефіцієнтів $A_k, B_k (k = \overline{1, n})$ та B_{n+1} , що беруть участь у структурах (3.119) - (3.120) загального розв'язку крайової задачі (3.116)-(3.118), дають алгебраїчну систему із $(2n+1)$ – го рівняння :

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{12}^{01}(q_1 l_0) A_1 + V_{12}^{02}(q_1 l_0) B_1 = 0 \\ V_{11}^{11}(q_1 l_1) A_1 + V_{11}^{12}(q_1 l_1) B_1 - V_{12}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{12}^{12}(q_2 l_1) B_2 = 0 \\ V_{21}^{11}(q_1 l_1) A_1 + V_{21}^{12}(q_1 l_1) B_1 - V_{22}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{22}^{12}(q_2 l_1) B_2 = G_1^* \\ \hline V_{11}^{k1}(q_k l_k) A_k + V_{11}^{k2}(q_k l_k) B_k - V_{12}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - V_{12}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = 0 \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) A_k + V_{21}^{k2}(q_k l_k) B_k - V_{22}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - V_{22}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = G_k^* \\ \hline V_{11}^{n,1}(q_n l_n) A_n + V_{11}^{n,2}(q_n l_n) B_n - (\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1}) B_{n+1} = 0 \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n) A_n + V_{21}^{n,2}(q_n l_n) B_n - (\bar{\beta}_{22}^n - \bar{\alpha}_{22}^n q_{n+1}) B_{n+1} = G_n^* \end{array} \right. \quad (3.134)$$

Функції G_k^* , що беруть участь в системі (3.134) мають вигляд :

$$G_k^* = c_{2_k} \int_{l_k}^{l_{k+1}} \frac{\Phi_{11}^{k+1}(q_{k+1}l_{k+1}, q_{k+1}\xi)}{\Delta_{11}(q_{k+1}l_k, q_{k+1}l_{k+1})} \mathcal{F}_{k+1}^*(p, \xi) d\xi - c_{1_k} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \frac{\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi)}{\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \mathcal{F}_k^*(p, \xi) d\xi, k = \overline{1, n-1}$$

$$G_n^* = c_{2_n} \int_{l_n}^{\infty} \frac{e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}}{\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1}} \mathcal{F}_{n+1}^*(p, \xi) d\xi - c_{1_n} \int_{l_{n-1}}^{l_n} \frac{\Phi_{12}^{n-1}(q_n l_{n-1}, q_n \xi)}{\Delta_{11}(q_n l_{n-1}, q_n l_n)} \mathcal{F}_n^*(p, \xi) d\xi. \quad (3.135)$$

Тут $c_{j_k} = \bar{\alpha}_{2j}^k \cdot \bar{\beta}_{1j}^k - \bar{\alpha}_{1j}^k \cdot \bar{\beta}_{2j}^k; k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2}$.

Припустимо, що виконана умова однозначної розв'язності крайової задачі (3.116) - (3.118): для $p = \sigma + iz$ із $\text{Re } p = \sigma \geq \sigma_0$ де σ_0 - абсциса збіжності інтегралу Лапласа та $\text{Im } p = \tau \in (-\infty, +\infty)$ визначник алгебраїчної системи (3.134) системи є відмінним від нуля:

$$\Delta^*(p) = (\bar{\alpha}_{22}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{22}^n) \Delta_{\overline{1, 2n}} - (\bar{\alpha}_{22}^n q_{n+1} - \bar{\beta}_{22}^n) \Delta_{\overline{1, 2n}} \neq 0. \quad (3.136)$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (3.134) і підстановки одержаних значень $A_k, B_k; k = \overline{1, n}$ та B_{n+1} у формули (3.119), (3.228), одержуємо єдиний розв'язок крайової задачі (3.116)-(3.118) у вигляді:

$$u_k^*(p, z) = \sum_{j=1}^{n+1} \int_{l_{j-1}}^{l_j} \mathcal{H}_{k,j}^*(p, z, \xi) \cdot \bar{g}_j(\xi) d\xi; k = \overline{1, n+1}; l_{n+1} = \infty. \quad (3.137)$$

Тут елементи матриці функції впливу $[\mathcal{H}_{ij}^*(p, z, \xi)]$, $i, j = \overline{1, n+1}$:

$$\mathcal{H}_{11}^*(p, z, \xi) = \frac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z)}{q_1 \Delta^*(p)} \left[\Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A'_{\overline{1, 2}} - \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \cdot A_{\overline{1, 2}} \right];$$

$$H_{1j}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=1}^{j-1} q_s c_{2_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \left[\Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{\overline{1, 2j}} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{\overline{1, 2j}} \right]; j = \overline{2, n};$$

$$H_{1, n+1}^*(p, z, \xi) = - \frac{\prod_{s=1}^n q_s c_{2_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \cdot e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)};$$

$$\mathcal{H}_{k1}^*(p, z, \xi) = \frac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi)}{q_1 \Delta^*(p)} \cdot \prod_{s=1}^{k-1} c_{1_s} q_s \cdot \left[\Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) \cdot A'_{\overline{1, 2k}} - \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) \cdot A_{\overline{1, 2k}} \right];$$

$$\mathcal{H}_{kj}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=j}^{k-1} q_s c_{1_s}}{q_j \Delta^*(p)} \left[\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{\overline{1, 2k}} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{\overline{1, 2k}} \right];$$

$$\cdot \left[\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) \cdot \Delta_{\overline{1, 2j-2}} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \cdot \Delta'_{\overline{1, 2j-2}} \right]; j = \overline{2, k-1}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{kj}^* (p, z, \xi) &= \frac{\prod_{s=k}^{s-1} q_s c_{2_s}}{q_k \cdot \Delta^*(p)} \left[\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta'_{1,2k-2} - \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta_{1,2k-2} \right] \cdot \\
&\cdot \left[\Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) \Delta'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) \Delta_{1,2j} \right]; \\
\mathcal{H}_{kk}^* (p, z, \xi) &= \frac{1}{q_k \cdot \Delta^*(p)} \left[\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta'_{1,2k-2} \right] \cdot \\
&\cdot \left[\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot \Delta_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) \cdot \Delta'_{1,2k} \right]; \\
\mathcal{H}_{k,n+1}^* (p, z, \xi) &= \frac{\prod_{s=k}^n q_s c_{2_s}}{q_k \Delta^*(p)} \left[\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \cdot \Delta'_{1,2k-2} \right] e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}, k = \overline{1, n} \\
\mathcal{H}_{n+1,1}^* (p, z, \xi) &= -\frac{1}{q_1 \Delta^*(p)} \prod_{s=1}^n c_{1_s} q_s \cdot \Phi_{12}^0(q, l_0, q, \xi) \cdot e^{-q_{n+1}(z - l_n)}; \\
\mathcal{H}_{n+1,j}^* (p, z, \xi) &= \frac{\prod_{s=j}^n c_{1_s} q_s}{q_j \cdot \Delta^*(p)} e^{-q_{n+1}(z - l_n)} \left[\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \cdot \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \cdot \Delta'_{1,2j-2} \right], \\
j &= \overline{2, n}; \\
\mathcal{H}_{n+1,n+1}^* (p, z, \xi) &= -\frac{1}{q_{n+1} \Delta^*(p)} e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)} \cdot \left[\Phi_{22}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta_{1,2n} - \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta'_{1,2n} \right].
\end{aligned}$$

Тут

$\Delta_{1,2k}$ – визначник, утворений з визначника системи $\Delta^*(p)$ шляхом викреслювання перших $2k$ рядків і стовпців (під номерами $\overline{1, 2k}$, $k = \overline{1, n}$);

$\Delta'_{1,2k}$ – визначник, утворений з визначника системи $\Delta^*(p)$ шляхом викреслювання перших $2k+1$ рядків за виключенням $2k$ -го (під номерами $\overline{1, 2k-1, 2k+1}$; $k = \overline{1, n}$) і перших $2k$ стовпців (під номерами $\overline{1, 2k}$, $k = \overline{1, n}$);

$\Delta_{1,2k}$ – визначник, утворений з перших $2k$ рядків і стовпців (під номерами $\overline{1, 2k}$, $k = \overline{1, n}$) визначника системи $\Delta^*(p)$;

$\Delta'_{1,2k}$ – визначник, утворений з перших $2k+1$ рядків за виключенням $2k$ -го (під номерами $\overline{1, 2k-1, 2k+1}$; $k = \overline{1, n}$) і перших $2k$ стовпців (під номерами $\overline{1, 2k}$, $k = \overline{1, n}$) визначника системи.

Рекурентні алгоритми обчислення визначників $\Delta_{1,2k}$ $\Delta'_{1,2k}$ $\Delta_{1,2k}$ $\Delta'_{1,2k}$ та елементів матриці $\left[\mathcal{H}_{ij}^*(p, z, \xi) \right]$, $i, j = \overline{1, n+1}$ подані в [21].

Особливими точками функцій впливу крайової задачі (3.112) -(3.115)

$\mathcal{H}_{k,k_1}^*(p, z, \xi), k, k_1 = \overline{1, n+1}$ є точки галуження $p = -\gamma_k^2, k = \overline{1, n+1}$ та $p = \infty$.

Внаслідок Леми Жордана і теореми Коші [15] маємо такі формули для знаходження оригіналів функцій впливу $\mathcal{H}_{k,k_1}^*(p, z, \xi), k, k_1 = \overline{1, n+1}$:

$$\mathcal{H}_{k,k_1}(t, z, \xi) = L^{-1} \left[\mathcal{H}_{k,k_1}^*(p, z, \xi) \right] = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \text{Im} \left[\mathcal{H}_{k,k_1}^*(-(\beta^2 + \gamma^2), z, \xi) \right] \cdot e^{-(\beta^2 + \gamma^2)} \beta d\beta. \quad (3.138)$$

Ми припустили, що $\gamma^2 = \max\{\gamma_k^2\}_{k=1}^{n+1}$ і поклали $q_k = ib_k$, де $b_k = (\beta^2 + k^2)^{1/2} D^{-1/2}$,

$k^2_k = \gamma^2 - \gamma_k^2 \geq 0, k = \overline{1, n+1}$. Безпосередньо підраховуючи, одержуємо:

$$\begin{aligned} \Delta_{m1}(ib_k l_{k-1}, ib_k l_k) &= i \cdot \delta_{m1}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \equiv i \cdot [v_{m2}^{k-1,1}(b_k l_{k-1}) \cdot v_{11}^{k2}(b_k l_k) - v_{m2}^{k-1,2}(b_k l_{k-1}) \cdot v_{11}^{k1}(b_k l_k)] \\ \Delta_{m2}(ib_k l_{k-1}, ib_k l_k) &= i \cdot \delta_{m2}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \equiv i \cdot [v_{m2}^{k-1,1}(b_k l_{k-1}) \cdot v_{21}^{k2}(b_k l_k) - v_{m2}^{k-1,2}(b_k l_{k-1}) \cdot v_{21}^{k1}(b_k l_k)] \\ \Delta_{m1}(ib_1 l_0, ib_1 l_1) &= i \cdot \delta_{m1}(b_1 l_0, b_1 l_1) \equiv i \cdot [v_{11}^{01}(b_1 l_0) \cdot v_{m1}^{12}(b_1 l_1) - v_{11}^{02}(b_1 l_0) v_{m1}^{11}(b_1 l_1)]; m = \overline{1, 2} \\ \Delta_{1,2}(ib_1) &= i \cdot \delta_{1,2}(\beta) \equiv i \cdot \delta_{11}(b_1 l_0, b_1 l_1); \Delta'_{1,2}(ib_1) = i \cdot \delta'_{1,2}(\beta) \equiv i \cdot \delta_{21}(b_1 l_0, b_1 l_1) \\ \Delta_{1,2k}(i\beta) &= i^k \cdot [\delta_{11}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \cdot \delta'_{1,2k-2}(\beta) - \delta_{21}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \cdot \delta_{1,2k-2}(\beta)] \equiv i^k \cdot \delta_{1,2k}(\beta) \\ \Delta'_{1,2k}(i\beta) &= i^k \cdot [\delta_{12}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \cdot \delta'_{1,2k-2}(\beta) - \delta_{22}(b_k l_{k-1}, b_k l_k) \cdot \delta_{1,2k-2}(\beta)] \equiv i^k \cdot \delta_{1,2k}(\beta) \\ \Delta^*(-(\beta^2 + \gamma^2)) &= i^n \cdot \left[(i \cdot \bar{\alpha}_{22}^n \cdot b_{n+1} - \bar{\beta}_{22}^n) \delta_{1,2n}(\beta) - (i \cdot \bar{\alpha}_{12}^n \cdot b_{n+1} - \bar{\beta}_{12}^n) \delta'_{1,2n}(\beta) \right] = \\ &= i^n \cdot \left\{ \left[\bar{\beta}_{12}^n \delta'_{1,2n}(\beta) - \bar{\beta}_{22}^n \delta_{1,2n}(\beta) \right] - i \cdot b_{n+1} \left[\bar{\alpha}_{12}^n \cdot \delta'_{1,2n}(\beta) - \bar{\alpha}_{22}^n \cdot \delta'_{1,2n}(\beta) \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} V_{jm}^{k1}(i \cdot q_s l_k) &= v_{jm}^{k1}(b_s l_k); V_{jm}^{k2}(i \cdot q_s l_k) = i \cdot v_{jm}^{k2}(b_s l_k); \Phi_{jm}^k(i \cdot b_s l_k, i \cdot b_k z) = i \cdot \phi_{jm}^k(b_s l_k, b_s z), j, m = \overline{1, 2} \\ v_{jm}^{k1}(b_s l_k) &= -\alpha_{jm}^k b_s \sin b_s l_k + \beta_{jm}^k \cos b_s l_k; v_{jm}^{k2}(b_s l_k) = \alpha_{jm}^k b_s \cos b_s l_k + \beta_{jm}^k \sin b_s l_k; \\ \phi_{jm}^k(b_s l_k, q_s z) &= v_{jm}^{k2}(b_s l_k) \cos b_s z - v_{jm}^{k1}(b_s l_k) \sin b_s z; \\ \bar{\alpha}_{jm}^k &= \alpha_{jm}^k - \delta_{jm}^k(\beta^2 + \gamma^2); \bar{\beta}_{jm}^k = \beta_{jm}^k - \gamma_{jm}^k(\beta^2 + \gamma^2). \end{aligned}$$

$$\text{Визначаємо числові матриці } A_{j1,k} = \begin{bmatrix} \alpha_{1j}^k & \beta_{1j}^k \\ \alpha_{2j}^k & \beta_{2j}^k \end{bmatrix}, A_{j2,k} = \begin{bmatrix} \delta_{1j}^k & \gamma_{1j}^k \\ \delta_{2j}^k & \gamma_{2j}^k \end{bmatrix}, j = 1, 2; k = \overline{1, n};$$

та числові величини: $c_{j1,k} = -\det A_{j1,k} \equiv \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k$; $c_{j2,k} = -\det A_{j2,k} \equiv \delta_{2j}^k \gamma_{1j}^k - \delta_{1j}^k \gamma_{2j}^k$
 $c_{j1,j2}^{12,k} = \alpha_{1j}^k \gamma_{2j}^k - \alpha_{2j}^k \gamma_{1j}^k$; $c_{j1,j2}^{21,k} = \beta_{1j}^k \delta_{2j}^k - \beta_{2j}^k \delta_{1j}^k$. Оскільки $\bar{c}_{jk} = c_{j1,k} + (c_{j1,j2}^{21,k} - c_{j1,j2}^{12,k})p + c_{j2,k}p^2$,
то вимагаємо виконання рівностей $c_{j1,j2}^{12,k} = c_{j1,j2}^{21,k}, c_{j2,k} = 0, j = 1, 2; k = \overline{1, n}$. Стосовно чисел $c_{j1,k}$ будемо вимагати, щоб $c_{11,k} c_{21,k} > 0$.

Визначимо функції:

$$V_1(z, \beta) = c_{21,1} b_2 \cdot [\omega_{02}(\beta) \cos b_1 z - \omega_{01}(\beta) \sin b_1 z]; \quad (3.139)$$

$$V_k(z, \beta) = \left(\prod_{j=k}^n c_{21,j} b_{j+1} \right) \cdot [\omega_{k-1,2}(\beta) \cos b_k z - \omega_{k-1,1}(\beta) \sin b_k z]; \quad (3.140)$$

$$V_{n+1}(z, \beta) = \omega_{n,2}(\beta) \cos b_{n+1} z - \omega_{n+1,1}(\beta) \sin b_1 z; \quad (3.141)$$

Тут

$$\begin{aligned} \omega_{01}(\beta) &= v_{11}^{01}(b_1 l_0); \omega_{02}(\beta) = v_{11}^{02}(b_1 l_0); \\ \omega_{km}(\beta) &= \omega_{k-1,2}(\beta) \cdot \psi_{1m}^k(b_k l_k, b_{k+1} l_k) - \omega_{k-1,1}(\beta) \cdot \psi_{2m}^k(b_k l_k, b_{k+1} l_k); \\ \psi_{jm}^k(b_k l_k, b_{k+1} l_k) &= v_{11}^{kj}(b_k l_k) \cdot v_{22}^{km}(b_{k+1} l_k) - v_{21}^{kj}(b_k l_k) \cdot v_{12}^{km}(b_{k+1} l_k) \end{aligned} \quad (3.142)$$

Введемо до розгляду спектральну функцію

$$V(z, \beta) = \sum_{k=1}^n V_k(z, \beta) \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z) + V_{n+1}(z, \beta) \theta(z - l_n), \quad (3.143)$$

спектральну густину

$$\Omega_n(\beta) = \frac{\beta}{b_{n+1} \cdot [\omega_{n,1}(\beta)^2 + \omega_{n,2}(\beta)^2]} \quad (3.144)$$

та вагову функцію

$$\sigma(z) = \sum_{k=1}^n \sigma_k(z, \beta) \theta(z - l_{k-1}) \theta(l_k - z) + \sigma_{n+1}(z, \beta) \theta(z - l_n) \quad (3.145)$$

$$\sigma_k = \prod_{j=k}^n \frac{c_{11,j}}{c_{21,j}} \frac{1}{D_k}, k = \overline{1, n-1}; \sigma_n = \frac{c_{11,n}}{c_{21,n}} \frac{1}{D_n}; \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}}. \quad (3.146)$$

У результаті виконання зазначених в формулі (3.138) операцій маємо оригінали елементів матриці функцій впливу:

$$\mathcal{H}_{jk}(t, z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} V_j(z, \beta) V_k(\xi, \beta) \Omega_n(\beta) \sigma_k D_k d\beta; j, k = \overline{1, n+1}. \quad (3.147)$$

Повертаючись у формулах (3.137) до оригіналів, одержуємо єдиний розв'язок параболічної крайової задачі (3.112) – (3.115):

$$u_k(t, z) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} V_k(z, \beta) \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} V_{k_1}(\xi, \beta) g_{k_1}(\xi) \sigma_{k_1} d\xi \cdot \Omega_n(\beta) d\beta, j = \overline{1, n+1}, l_{n+1} = \infty. \quad (3.148)$$

Звідси внаслідок початкових умов (3.113) отримуємо інтегральне зображення:

$$g_k(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty V_k(z, \beta) \Omega_n(\beta) \int_{l_{k-1}}^{l_k} V_k(\xi, \beta) g_k(\xi) \sigma_{k_1} d\xi d\beta. \quad (3.149)$$

Якщо покласти $g(z) = \sum_{k=1}^n \theta(z - l_{k-1})\theta(l_k - z)g_k(z) + \Theta(z - l_n)g_{n+1}(z)$ та

спектральні функції густину, визначені (3.145), (3.146), то інтегральне зображення (3.148) можна записати в інваріантній формі:

$$g(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty V(z, \beta) \Omega_n(\beta) \int_{l_0}^\infty V(\xi, \beta) g(\xi) \sigma(\xi) d\xi d\beta \quad (3.150)$$

Інтегральне зображення (3.148) визначає пряме $F_{+,n+1}$ та обернене $F_{+,n+1}^{-1}$ інтегральне перетворення Фур'є із спектральним параметром для n -складового неоднорідного середовища :

$$F_{+,n+1}[g(z)] = \int_{l_0}^\infty g(z) V(z, \beta) \sigma(z) dz \equiv \tilde{g}(\beta), \quad (3.151)$$

$$F_{+,n+1}^{-1}[\tilde{g}(\beta)] = \int_0^\infty \tilde{g}(\beta) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta \equiv g(z). \quad (3.152)$$

Математичним обґрунтуванням запровадженого формулами (3.150) (3.151) інтегрального перетворення Фур'є є твердження:

Теорема 3.3.1 (про інтегральне зображення): Якщо вектор-функція $g(z)$ неперервна, абсолютно сумовна й має обмежену варіацію на множині (l_0, ∞) , то для будь-якого $z \in I_n^+$ справедливе інтегральне зображення (3.150).

Доведення: Функції $V_j(z, \beta)$ та $V_j(z, \lambda)$ за побудовою задовольняють диференціальні рівняння:

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + (\beta^2 + k_j^2) D_j \right] V_j(z, \beta) = 0, \quad (3.153)$$

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + (\lambda^2 + k_j^2) D_j \right] V_j(z, \lambda) = 0. \quad (3.154)$$

Помножимо рівність (3.126) на функцію $V_j(z, \lambda)$, а рівність (3.153) на функцію $V_j(z, \beta)$ і віднімемо від першої другу:

$$V_j(z, \beta) V_j(z, \lambda) = \frac{D_j}{\beta^2 + \lambda^2} \frac{d}{dz} \left[V_j(z, \beta) \frac{d}{dz} V_j(z, \lambda) - V_j(z, \lambda) \frac{d}{dz} V_j(z, \beta) \right]. \quad (3.155)$$

Задамо досить велике число $A > l_n$. Внаслідок властивостей функцій $V_j(z, \beta) V_j(z, \lambda)$, структури сталих σ_k і рівності (3.4.45) маємо, що

$$\int_{l_0}^A V(x, \beta) V(x, \lambda) \sigma(x) dx = \frac{1}{\beta^2 - \lambda^2} \left[V_{n+1}(A, \beta) \frac{d}{dx} V_{n+1}(A, \lambda) - V_{n+1}(A, \lambda) \frac{d}{dx} V_{n+1}(A, \beta) \right] \quad (3.156)$$

Позаінтегральний член в точці $z = l_0$ рівний нулю внаслідок виконання крайової умови в точці $z=l_0$ функцією $V_I(z, \dots)$, позаінтегральні члени в точках $z = l_k$ перетворюється в нуль внаслідок вибору σ_k , та інтерфейсних умов (нагадаємо, що $g_0=0$, $\psi_{jk}=0$, $j=1,2$; $k=\overline{1,n}$). Для довільних додатних чисел c і d ($c < d$) та довільної обмеженої на сегменті $[c, d]$ функції $\psi(\beta)$, обчислимо подвійний інтеграл

$$\begin{aligned} J_n &= \frac{2}{\pi} \int_{l_0}^{\infty} \int_c^d \psi(\beta) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta V(z, \lambda) \sigma(z) = \\ &= \lim_{A \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \int_{l_0}^A \int_c^d g(\beta) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta V(z, \lambda) \sigma(z) \end{aligned} \quad (3.157)$$

Внаслідок рівності (3.156) подвійний інтеграл (3.157) набуває вигляду :

$$J_n = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{2}{\pi} \int_c^d \frac{\psi(\beta)}{\beta^2 - \lambda^2} [V_{n+1}(A, \beta) V'_{n+1}(A, \lambda) - V_{n+1}(A, \lambda) V'_{n+1}(A, \beta)] \Omega_n(\beta) d\beta. \quad (3.158)$$

Безпосередньо отримуємо :

$$\begin{aligned} &2[V_{n+1}(A, \beta) V'_{n+1}(A, \lambda) - V_{n+1}(A, \lambda) V'_{n+1}(A, \beta)] = \\ &= z_{n+1}^- [\omega_{n2}(\beta) \omega_{n2}(\lambda) - \omega_{n1}(\beta) \omega_{n1}(\lambda)] \sin z_{n+1}^+ A + z_{n+1}^+ [\omega_{n1}(\beta) \omega_{n1}(\lambda) + \omega_{n2}(\beta) \omega_{n2}(\lambda)] \sin z_{n+1}^- A + \\ &+ z_{n+1}^- [\omega_{n1}(\beta) \omega_{n2}(\lambda) + \omega_{n1}(\lambda) \omega_{n2}(\beta)] \cos z_{n+1}^+ A + z_{n+1}^+ [\omega_{n1}(\beta) \omega_{n2}(\lambda) - \omega_{n1}(\lambda) \bar{\omega}_{n2}(\beta)] \cos z_{n+1}^- A; \\ &z_{n+1}^{\pm} = b_{n+1}(\beta) \pm b_{n+1}(\lambda). \end{aligned} \quad (3.159)$$

У припущенні, що функція $\psi(\beta)$ неперервна, абсолютно інтегрована й має обмежену варіацію на множині $[c, d]$, підстановка (3.158) в (3.157) з наступним використанням лем Рімана й Дирихле [32] приводить до рівності

$$\frac{2}{\pi} \int_{l_0}^{\infty} \int_c^d \psi(\beta) V(z, \beta) V(z, \lambda) \Omega_n(\beta) d\beta \sigma(z) dz = \begin{cases} \psi(\lambda), & \lambda \in [c, d], \\ 0, & \lambda \notin [c, d]. \end{cases} \quad (3.160)$$

Якщо ж функція $\psi(\beta)$ володіє вище вказаним властивостями на проміжку $(0, \infty)$, то одержуємо, що

$$\frac{2}{\pi} \int_{l_0}^{\infty} \int_0^{\infty} \psi(\beta) V(z, \beta) V(z, \lambda) \Omega_n(\beta) d\beta \sigma(z) dz = \begin{cases} \psi(\lambda), & \lambda \in (0, \infty) \\ 0, & \lambda \notin (0, \infty). \end{cases} \quad (3.161)$$

Припустимо, що вектор - функція $g(z)$ має вигляд

$$g(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \psi(\beta) V(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta. \quad (3.162)$$

Помножимо (3.161) на $V(z, \lambda) \sigma(z) dz$, де λ - довільне додатне число і проінтегруємо від $z=l_0$ до $z=\infty$. На основі рівності (3.161) одержимо, що

$$\int_{l_0}^{\infty} g(z) V(z, \lambda) \sigma(z) dz = \psi(\lambda) S_+(\lambda); \quad S_+(\lambda) = \begin{cases} 1, & \lambda > 0, \\ 0, & \lambda < 0. \end{cases}$$

Якщо тепер підставити функцію $g(\beta) = \int_{l_0}^{\infty} f(\xi) V(\xi, \beta) \sigma(\xi) d\xi$ в рівність (3.162), то одержимо формулу (3.148) - інтегральне зображення вектор- функції $g(z) = \{g_1(z), g_2(z), \dots, g_{n+1}(z)\}$. Доведення теореми завершено.

Зауваження: Якщо вектор-функція $g(z)$ кусково-неперервна, то в лівій частині (3.147) замість $g(x)$ стоятиме $\frac{1}{2}[g(z-0) + g(z+0)]$.

З метою застосування одержаного інтегрального перетворення для побудови точних аналітичних розв'язків математичних моделей масопереносу одержимо основну тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора L_n .

Теорема 3.3.2 (про основну тотожність). Нехай виконуються співвідношення:

$$C_{11,k} \cdot C_{21,k} > 0, \quad C_{j2,k} = 0, \quad C_{j1,j2}^{21,k} = C_{j1,j2}^{12,k}; \quad j=1,2; \quad k=\overline{1,n} \quad (3.163)$$

Якщо вектор - функція $g(x) \in C^{(3)}(I_n^+)$, задовольняє крайові умови

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^0 \right) g_1(z) \Big|_{z=l_0} = g_{10}, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} \left[\frac{d^m}{dz^m} g_{n+1}(z) \right] = 0, \quad m=0,1 \quad (3.164)$$

і умови спряження (3.164), то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора L_n :

$$F_{+,n} [L_n g(z)] = -\beta^2 \cdot \tilde{g}(\beta) - \sigma_1 D_1 (\bar{\alpha}_{11}^0)^{-1} V_1(l_0, \beta) \cdot g_{10} - \\ - \sum_{j=1}^n k_j^2 \int_{l_{j-1}}^{l_j} g_j(z) V_j(z, \beta) \sigma_j dz - k_{n+1}^2 \int_{l_n}^{\infty} g_{n+1}(z) V_{n+1}(z, \beta) \sigma_{n+1} dz \quad (3.165)$$

Доведення: Оскільки функції $g_j(z)$ та $V_j(z, \beta)$ $j=\overline{1, n+1}$ задовольняють систему інтерфейсних умов (3.115), то при виконанні співвідношень (3.163) отримуємо базову тотожність:

$$\left[g'_j(z) V_j(z, \beta) - g_j(z) V'_j(z, \beta) \right] \Big|_{z=l_j} = \\ = \frac{c_{21,j}}{c_{11,j}} \left[g'_{j+1}(z) V_{j+1}(z, \beta) - g_{j+1}(z) V'_{j+1}(z, \beta) \right] \Big|_{z=l_j}; \quad j=\overline{1, n} \quad (3.166)$$

Проінтегруємо в лівій частині (3.165) під знаками інтегралів два рази частинами:

$$\begin{aligned}
F_{+,n}[L_n g(z)] &= \sum_{j=1}^n D_j \int_{l_{j-1}}^{l_j} \frac{d^2 g_j}{dz^2} z V_j(z, \beta) \sigma_j dz + \\
&+ D_{n+1} \int_{l_n}^{\infty} \frac{d^2 g_{n+1}}{dz^2} z V_{n+1}(z, \beta) \sigma_{n+1} dz = \sum_{j=1}^n D_j \sigma_j (g'_j z V_j(z, \beta) - g_j z V'_j(z, \beta)) \Big|_{z=l_{j-1}}^{z=l_j} \\
&+ g'_{j+1} z V_{j+1}(z, \beta) - g_{j+1} z V'_{j+1}(z, \beta) \Big|_{z=l_n}^{\infty} - \sum_{j=1}^{n+1} \beta^2 + k_j^2 \int_{l_{j-1}}^{l_j} g_j x V_j(x, \beta) \sigma_j dx, \quad l_{n+1} = \infty
\end{aligned} \tag{3.167}$$

Позаінтегральні члени в точках $z = l_j (j = \overline{1, n})$ перетворюються в нуль внаслідок базової тотожності (3.166) та структури $\sigma_k, k = \overline{1, n+1}$. Позаінтегральний член в точці $x = l_0$ перетворюється до вигляду $\tilde{\alpha}_{11}^0{}^{-1} V_1 l_0, \beta g_{10}$. Внаслідок умови поведінки $g_{n+1}(z)$ при $z \rightarrow \infty$ маємо: $\lim_{z \rightarrow \infty} g'_{n+1} z V_{n+1}(z, \beta) - g_{n+1} z V'_{n+1}(z, \beta) = 0$. Розбиваючи суму, що залишилася, на дві, приходимо до тотожності (3.165).

Логічну схему застосування запровадженого формулами (3.151), (3.152) інтегрального перетворення Фур'є покажемо на прикладах побудови точних аналітичних розв'язків математичних моделей масопереносу.

Квазістаціонарна модель: Побудувати обмежений в області $D_n^+ t, z : t \in 0, \infty ; z \in I_n^+$ розв'язок системи диференціальних рівнянь масопереносу параболічного типу для напівобмеженого n – складового неоднорідного середовища з врахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів переносу на поверхнях масообміну $z = l_j, j = \overline{0, n}$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_j^2 - a_j^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_j(t, z) = f_j(t, z), \quad j = \overline{1, n+1} \tag{3.168}$$

за початковими умовами:

$$u_j(t, z) \Big|_{t=0} = g_j(z), \quad j = \overline{1, n+1}, \quad z \in l_{j-1}, l_j ; l_{n+1} = \infty \tag{3.169}$$

крайовими умовами:

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_j \Big|_{z=l_0} = g_{10}(t), \quad \frac{\partial u_{n+1}}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0 \tag{3.170}$$

та системою n - інтерфейсних умов:

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^m + \delta_{j1}^m \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^m + \gamma_{j1}^m \frac{\partial}{\partial t} \right] u_m(t, z) - \left[\left(\alpha_{j2}^m + \delta_{j2}^m \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^m + \gamma_{j2}^m \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{m+1}(t, z) \right\} \Big|_{z=l_m} = \Psi_{jm}(t) \quad (3.171)$$

Побудова розв'язку : Нехай виконані співвідношення (3.126). Припустимо, що $\max \gamma_1^2; \gamma_1^2; \dots; \gamma_{n+1}^2 = \gamma_1^2$ Покладемо всюди $k_j^2 = \gamma_1^2 - \gamma_j^2 \geq 0, j = \overline{1, n+1}$ Запишемо систему (3.168) і початкові умови (3.169) у матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_1^2 - D_1 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_1 \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_2^2 - D_2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_2 \\ \dots \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_{n+1}^2 - D_{n+1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_{n+1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, z) \\ f_2(t, z) \\ \dots \\ f_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_1(z) \\ g_2(z) \\ \dots \\ g_{n+1}(z) \end{bmatrix} \quad (3.172)$$

Інтегральний оператор $F_{+,n}$ зобразимо у вигляді операторної матриці – рядка:

$$F_{+,n} \dots = \left[\int_{l_0}^{l_1} \dots V_1(z, \beta) \sigma_1 dz \int_{l_1}^{l_2} \dots V_2(z, \beta) \sigma_2 dz \dots \int_{l_{n-1}}^{l_n} \dots V_n(z, \beta) \sigma_n dz \int_{l_n}^{\infty} \dots V_{n+1}(z, \beta) \sigma_{n+1} dz \right]. \quad (3.173)$$

Застосуємо до задачі (3.172) за правилом множення матриць операторну матрицю – рядок (3.173). Внаслідок основної тотожності (3.165) одержуємо задачу Коші:

$$\left[\frac{d}{dt} + \beta^2 + \gamma_1^2 \right] \tilde{u}(t, \beta) = \tilde{F}(t, \beta); \tilde{u}(t, \beta) \Big|_{t=0} = \tilde{g}(\beta) \quad (3.174)$$

Тут

$$\begin{aligned} \tilde{u}(t, \beta) &= \sum_{j=1}^{n+1} \tilde{u}_j(t, \beta); \tilde{g}(\beta) = \sum_{j=1}^{n+1} \tilde{g}_j(\beta); \tilde{F}(t, \beta) = \\ &= \sum_{j=1}^{n+1} \tilde{f}_j(t, \beta) + \sum_{m=1}^n \frac{a_m^2 \sigma_m}{c_{11,m}} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^m \frac{dV_{m+1}}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^m V_{m+1}(z, \beta) \right) \Big|_{z=l_m} \Psi_{2m}(t) - \right. \\ &\quad \left. - \left(\tilde{\alpha}_{22}^m \frac{dV_{m+1}}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^m V_{m+1}(z, \beta) \right) \Big|_{x=l_m} \Psi_{1m}(t) \right] - \frac{a_1^2 \sigma_1}{\tilde{\alpha}_{11}^0} V_1(l_0, \beta) g_{10}(t) \\ \tilde{u}_j(t, \beta) &= \int_{l_{j-1}}^{l_j} u_j(t, z) V_j(z, \beta) \sigma_j dz; j = \overline{1, n+1}, l_0 \geq 0, l_{n+1} = \infty \end{aligned}$$

аналогічно $\tilde{g}_j(\beta)$ та $\tilde{f}_j(t, \beta)$

Розв'язком задачі Коші (3.4.65) є функція

$$\tilde{u}(t, \beta) = e^{-\beta^2 + \gamma_1^2 t} \tilde{g}(\beta) + \int_0^t e^{-\beta^2 + \gamma_1^2 t - \tau} \tilde{F}'(\tau, \beta) d\tau \quad (3.175)$$

Обернений до оператора (3.173) оператор $F_{+,n}^{-1}$ має структуру:

$$F_{+,n}^{-1} \dots = \left[\begin{array}{l} \frac{2}{\pi} \int_0^\infty ... V_1(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta \\ \frac{2}{\pi} \int_0^\infty ... V_2(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta \\ \\ \frac{2}{\pi} \int_0^\infty ... V_{n+1}(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta \end{array} \right] \quad (3.176)$$

Застосуємо за правилом множення матриць операторну матрицю – стовпець (3.176) до матриці – елемента $\tilde{y}(t, \beta)$, де функція $\tilde{y}(t, \beta)$ визначена формулою (3.175). У результаті елементарних перетворень отримуємо компоненти

$$\begin{aligned}
u_j(t, z) = & \sum_{m=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{m-1}}^{l_m} \mathcal{H}_{jm}(t-\tau, z, \xi) [f_m(\tau, \xi) + g_m(\xi) \delta_+(\tau)] \sigma_m d\xi d\tau + \\
& + \int_0^t G_{1j}(t-\tau, z) g_{10}(\tau) d\tau + \sum_{m=1}^n \int_0^t [\mathcal{R}_{jm,1}(t-\tau, z) \Psi_{2m}(\tau) - \\
& - \mathcal{R}_{jm,2}(t-\tau, z) \Psi_{1m}(\tau)] d\tau, j = \overline{1, n+1}
\end{aligned} \tag{3.177}$$

вектор – функція $u(t, z) = u_1(t, z); u_2(t, z); \dots; u_{n+1}(t, z)$ яка повністю описує розв'язок параболічної задачі масопереносу (3.168) – (3.171).

Тут головні розв'язки крайової задачі:

- функцій впливу, породжена неоднорідністю системи (3.168)

$$\mathcal{H}_{jm}(t, z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 - \gamma_1^2)t} V_j(z, \beta) V_m(\xi, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta; j, m = \overline{1, n+1};$$

- функція Гріна, породжена крайовою умовою на межі $z = l_0$

$$G_{1j}(t, z) = -a_1^2 \sigma_1 \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma_1^2)t} \frac{V_1(l_0, \beta)}{\tilde{\alpha}_{11}^0(\beta)} V_j(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta; j = \overline{1, n+1},$$

- функцій Гріна, породжені системою інтерфейсних умов

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{jm,k}(t,z) = & \frac{2}{\pi} \frac{\sigma_m a_m^2}{c_{11,m}} \int_0^\infty e^{-\beta^2 - \gamma_1^2 t} (\tilde{\alpha}_{k2}^m V'_{m+1}(l_m, \beta) + \\ & + \tilde{\beta}_{k2}^m V_{m+1}(l_m, \beta)) V_j(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta; j = \overline{1, n+1}, m = \overline{1, n}, k = 1, 2 \end{aligned}$$

Динамічна модель: Побудувати обмежений в області D_n^+ розв'язок системи диференціальних рівнянь масопереносу гіперболічного типу для напівобмеженого п-складового неоднорідного середовища з врахуванням швидкостей зміни градієнтів концентрацій на масообмінних поверхнях $z = l_j, j = 0, n$:

$$\frac{\partial^2 u_j}{\partial t^2} + \chi_j^2 u_j - \alpha_j^2 \frac{\partial^2 u_j}{\partial z^2} = f_j(t, z), z \in (l_{j-1}, l_j), j = \overline{1, n+1} \quad (3.178)$$

за початковими умовами

$$u_j(t, z)|_{t=0} = g_{1j}(z), \frac{\partial u_j}{\partial t}|_{t=0} = g_{2j}(z), j = \overline{1, n+1} \quad (3.179)$$

крайовими умовами

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_1(t, z) \Big|_{x=l_0} = g_{10}(t); \frac{\partial}{\partial t} u_{n+1}(t, z) \Big|_{z=\infty} = \infty \quad (3.180)$$

та системою інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_k(t, x) - \left[\left(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] u_{k+1}(t, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = \psi_{jk}(t) \quad (3.181)$$

.

Побудова розв'язку Запишемо систему (3.179) і початкові умови (3.182) у матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_1^2 - \alpha_1^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) u_1(t, z) \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_2^2 - \alpha_2^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_2(t, z) \\ \dots\dots\dots \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \chi_{n+1}^2 - \alpha_{n+1}^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, z) \\ f_2(t, z) \\ \dots\dots\dots \\ f_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} \quad (3.182)$$

$$\begin{bmatrix} T_1(t, x) \\ T_2(t, x) \\ \dots\dots\dots \\ T_{n+1}(t, x) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_{11}(x) \\ g_{12}(x) \\ \dots\dots\dots \\ g_{1, n+1}(x) \end{bmatrix}; \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} T_1(t, x) \\ T_2(t, x) \\ \dots\dots\dots \\ T_{n+1}(t, x) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_{21}(x) \\ g_{22}(x) \\ \dots\dots\dots \\ g_{2, n+1}(x) \end{bmatrix}$$

У припущенні, що $\max \{ \gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_n^2; \gamma_{n+1}^2 \} = \gamma_{n+1}^2$, застосуємо до задачі (3.182) за правилом множення матриць операторну матрицю-рядок (3.173). Внаслідок тотожності (3.165) одержуємо задачу Коші:

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + (\beta^2 + \gamma_1^2) \right] \tilde{u}(t, \beta) = \tilde{F}(t, \beta), \tilde{u}(t) \Big|_{t=0} = g_1(\beta), \frac{d}{dt} \tilde{u}(t) \Big|_{t=0} = \tilde{g}_2(\beta) \quad (3.183)$$

Розв'язком задачі Коші (3.183) є функція

$$\tilde{u}(t, \beta) = \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} \tilde{g}_2(\beta) + \frac{d}{dt} \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} \tilde{g}_1(\beta) + \int_0^t \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} (t - \tau)}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} \tilde{F}(\tau, \beta) d\tau. \quad (3.184)$$

У результаті застосування до матриці – елемента $\tilde{u}(t, \beta)$, де функція $\tilde{u}(t, \beta)$ визначена формулою (3.183), за правилом множення матриць операторної матриці – стовпця (3.175) отримуємо структуру компонентів

$$\begin{aligned} u_j(t, z) = & \sum_{m=1}^{n+1} \int_0^t \int_{l_{m-1}}^{l_m} \mathcal{H}_{jm}(t - \tau, z, \xi) [f_m(\tau, \xi) + g_{2m}(\xi) \delta_+(\tau)] \sigma_m d\xi d\tau + \\ & + \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{n+1} \int_{l_{m-1}}^{l_m} \mathcal{H}_{jm}(t, z, \xi) g_{1m}(\xi) \sigma_m d\xi + \int_0^t W_{1,j}(t - \tau, z) g_{10}(\tau) d\tau + \\ & + \sum_{m=1}^n \int_0^t [\mathcal{R}_{jm,1}(t - \tau, z) \Psi_{2m}(\tau) - \mathcal{R}_{jm,2}(t - \tau, z) \Psi_m(\tau)] d\tau, j = \overline{1, n+1} \end{aligned} \quad (3.185)$$

вектор – функції $u(t, z) = u_1(t, z); u_2(t, z); \dots; u_{n+1}(t, z)$ яка повністю визначає єдиний розв'язок гіперболічної задачі (3.178) – (3.181).

Тут головні розв'язки крайової задачі:

- функції впливу, породжена неоднорідністю системи (3.182)

$$\mathcal{H}_{jk}(t, z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} V_j(z, \beta) V_k(\xi, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta; j, k = \overline{1, n+1}$$

- функції Гріна, породжений крайовою умовою на межі $z = l_0$

$$W_{1,j}(t, z) = -a_1^2 \sigma_1 \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} \frac{V_1(l_0, \beta)}{\tilde{\alpha}_{11}^0(\beta)} V_j(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta; j = \overline{1, n+1}$$

- функції Гріна, породжені системою n -інтерфейсних умов

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{jm,k}(t, z) = & \frac{2}{\pi} \frac{\sigma_m a_m^2}{c_{11,m}} \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} (\tilde{\alpha}_{k2}^m V'_{m+1}(l_m, \beta) + \\ & + \tilde{\beta}_{k2}^m V_{m+1}(l_m, \beta)) V_j(z, \beta) \Omega_n(\beta) d\beta; j = \overline{1, n+1}, m = \overline{1, n}, k = 1, 2 \end{aligned}$$

Розв'язок (3.184) виписаний при умові, що

$$g_{11,j}^0 \equiv \delta_{11}^0; g'_{1j}(l_0) + \gamma_{11}^0 g_{1j}(l_0) = 0$$

$$\Psi_{jm,i}^0 \equiv \delta_{j1}^m g'_{mi}(l_m) + \gamma_{j1}^m g_{mi}(l_m) - \delta_{j2}^m g'_{m+1}(l_m) + \gamma_{j2}^m g_{m+1}(l_m) = 0$$

$$j, i = 1, 2; m = \overline{1, n}$$

У протилежному випадку у формулі (3.185) появляються ще складові

3.4. Скінченні інтегральні перетворення Фур'є для необмежених неоднорідних середовищ переносу

Запровадимо інтегральне перетворення Фур'є для необмеженого неоднорідного середовища переносу в області $I_2 = \{z : z \in (-\infty, l_1) \cup (l_1, l_2) \cup (l_2, \infty); l_1 < l_2\}$, породженого диференціальним оператором Фур'є другого порядку

$$L_2 = [D_1 \Theta(l_1 - z) + D_2 \Theta(z - l_1) \Theta(l_2 - z) + D_3 \Theta(z - l_2)] \frac{d^2}{dz^2} \quad (3.186)$$

з врахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів переносу на масообмінних межах $z = l_1$ та $z = l_2$ тобто мають місце нестационарні інтерфейсні умови, записані в узагальненому виді:

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \gamma_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t} + \beta_{j1}^k \right] u_k(t, z) - \left[\left(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \gamma_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t} + \beta_{j2}^k \right] u_{k+1}(t, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = 0; j, k = 1, 2. \quad (3.187)$$

У рівностях (3.186) $\alpha_{ij}^k \geq 0, c_{1k} c_{2k} > 0, c_{jk} = \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k$. Спектр диференціального оператора L_2 є неперервним, а спектральна вектор-функція є комплексно-значною: $V(z, \beta) = \{V_1(z, \beta); V_2(z, \beta); V_3(z, \beta)\} \equiv V_1(z, \beta) + iV_2(z, \beta)$, оскільки диференціальний оператор L_2 має дві особливі точки $z = -\infty$ та $z = +\infty$.

Інтегральне перетворення Фур'є побудуємо з використанням ядра Коші як фундаментальної матриці розв'язків задачі Коші для спектральної системи диференціальних рівнянь масопереносу параболічного типу, породженої оператором L_2 . Отже, розглянемо задачу побудови обмеженого в області $D_2 = \{(t, z) : t \in (0, \infty), z \in I_2 = (-\infty, l_1) \cup (l_1, l_2) \cup (l_2, \infty)\}$ розв'язку системи диференціальних рівнянь масопереносу в частинних похідних

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_j^2 + D_j \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) u_j(t, z) = 0, t \in (l_{j-1}, l_j), j = \overline{1, 3}; l_0 = -\infty, l_3 = \infty \quad (3.188)$$

за початковими умовами

$$u_j(t, z) \Big|_{t=0} = g_j(z), z \in (l_{j-1}, l_j), g = \overline{1, 3} \quad (3.189)$$

та інтерфейсними умовами (3.186).

В припущенні, що шукана вектор-функція $u(t, z) = \{u_1(t, z); u_2(t, z); u_3(t, z)\}$ є оригіналом за Лапласом щодо t [15], у зображенні за Лапласом одержуємо крайову задачу: побудувати обмежений на множині I_2 розв'язок системи звичайних диференціальних рівнянь

$$\left(\frac{d^2}{dz^2} - q_j^2\right)u_j^*(p, z) = -\bar{g}_j(z), z \in (l_{j-1}, l_j), j = \overline{1, 3} \quad (3.190)$$

за інтерфейсними умовами

$$\left\{ \left[(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k p) \frac{d}{dz} + \beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k p \right] u_k^*(p, z) - \left[(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k p) \frac{d}{dz} + \beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k p \right] u_{k+1}^*(p, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = 0, j, k = 1, 2 \quad (3.191)$$

Тут $\bar{g}_j(z) = D_j^{-1} g_j(z); q_j = D_j^{-1/2} (p + \gamma_j^2)^{1/2}, \operatorname{Re} q_j > 0, j = \overline{1, 3}$. Будемо вважати, що числа $\psi_{jk} \equiv [\delta_{j1}^k g'_k(l_k)] - [\delta_{j2}^k g'_{k+1}(l_k) + \gamma_{j2}^k g'_{k+1}(l_k)] = 0, j, k = 1, 2$. У протилежному випадку переходимо від початкових даних $g(z) = \{g_1(z); g_2(z); g_3(z)\}$ до початкових даних $\varphi(z) = \{\varphi_1(z); \varphi_2(z); \varphi_3(z)\}$ з лінійними доавками.

Обмежений в області I_2 розв'язок крайової задачі (3.190), (3.191) будемо за правилами:

$$\begin{aligned} u_1^*(p, z) &= A_1 e^{q_1(z-l_1)} + \int_{-\infty}^{l_1} \mathcal{E}_1^*(p, z, \xi) \bar{g}_1(\xi) d\xi, \\ u_2^*(p, z) &= A_2 \operatorname{ch} q_2 z + B_2 \operatorname{sh} q_2 z \int_{l_1}^{l_2} \mathcal{E}_2^*(p, z, \xi) \bar{g}_2(\xi) d\xi, \\ u_3^*(p, z) &= B_3 e^{-q_3(z-l_2)} + \int_{l_2}^{\infty} \mathcal{E}_3^*(p, z, \xi) \bar{g}_3(\xi) d\xi. \end{aligned} \quad (3.192)$$

Тут $\mathcal{E}_k^*(p, z, \xi)$ - функції Коші, які внаслідок симетрії відносно точки $x = \xi$ мають структуру:

$$\mathcal{E}_1^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_1(\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 + \bar{\beta}_{11}^1)} \begin{cases} e^{q_1(z-l_1)} \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi), & -\infty < z < \xi < l_1 \\ e^{q_1(\xi-l_1)} \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 z), & -\infty < \xi < z < l_1 \end{cases} \quad (3.193)$$

$$\mathcal{E}_2^*(p, z, \xi) = -\frac{1}{q_2 \Delta_{11}^*(q_2 l_1, q_2 l_2)} \begin{cases} \Phi_{12}^1(q_2 l_1, q_2 z) \Phi_{11}^2(q_2 l_1, q_2 \xi), & l_1 < z < \xi < l_2 \\ \Phi_{12}^1(q_2 l_1, q_2 \xi) \Phi_{11}^2(q_2 l_1, q_2 z), & l_1 < \xi < z < l_2 \end{cases} \quad (3.194)$$

$$\mathcal{E}_3^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_3(\bar{\alpha}_{12}^2 q_3 - \bar{\beta}_{12}^2)} \begin{cases} e^{-q_3(\xi-l_2)} \Phi_{12}^2(q_3 l_2, q_3 z), & l_2 < z < \xi < \infty \\ e^{-q_3(z-l_2)} \Phi_{12}^2(q_3 l_2, q_3 \xi), & l_2 < \xi < z < \infty \end{cases} \quad (3.195)$$

Тут $\bar{\alpha}_{jk}^m = \alpha_{jk}^m + \delta_{jk}^m p, \bar{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m + \gamma_{jk}^m p, j, k, m = 1, 2$.

$$V_{jk}^{m1}(q_s l_m) = \bar{\alpha}_{jk}^m q_s \operatorname{sh} q_s l_m + \bar{\beta}_{jk}^m q_s \operatorname{ch} q_s l_m; V_{jk}^{m2}(q_s l_m) = \bar{\alpha}_{jk}^m q_s \operatorname{ch} q_s l_m + \bar{\beta}_{jk}^m q_s \operatorname{sh} q_s l_m;$$

$$\Phi_{jk}^m(q_s l_m, q_s x) = V_{jk}^{m1}(q_s l_m) = q_s \operatorname{ch} q_s x - V_{jk}^{m2}(q_s l_m) q_s \operatorname{sh} q_s x.$$

Інтерфейсні умови для визначення сталих A_1, A_2, B_2 , та B_3 дають алгебраїчну систему з чотирьох рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} (\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 + \bar{\beta}_{11}^1) A_1 - V_{12}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{12}^{12}(q_2 l_1) B_2 &= 0 \\ (\bar{\alpha}_{21}^1 q_1 + \bar{\beta}_{21}^1) A_1 - V_{22}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{22}^{12}(q_2 l_1) B_2 &= G_{12}^* \\ V_{12}^{21}(q_2 l_2) A_2 + V_{11}^{22}(q_2 l_2) B_2 + (\bar{\alpha}_{12}^2 q_1 + \bar{\beta}_{12}^2) B_3 &= 0 \\ V_{21}^{21}(q_2 l_2) A_2 + V_{21}^{22}(q_2 l_2) B_2 + (\bar{\alpha}_{22}^2 q_1 + \bar{\beta}_{22}^2) B_3 &= G_{23}^* \end{aligned} \right\} \quad (3.196)$$

$$\begin{aligned} \text{Тут } G_{12}^* &= c_{11}^* \int_{-\infty}^{l_1} \frac{e^{q_1(\xi-l_1)}}{\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 + \bar{\beta}_{11}^1} \bar{g}_1(\xi) d\xi + c_{21} \int_{l_1}^{l_2} \frac{\Phi_{11}^2(q_2 l_2, q_2 \xi)}{\Delta_{11}^*(q_2 l_1, q_2 l_2)} \bar{g}_2(\xi) d\xi; \\ G_{23}^* &= c_{12}^* \int_{l_1}^{l_2} \frac{\Phi_{12}^1(q_2 l_1, q_2 \xi)}{\Delta_{11}^*(q_2 l_1, q_2 l_2)} \bar{g}_2(\xi) d\xi + c_{21} \int_{l_2}^{\infty} \frac{e^{q_3(\xi-l_2)}}{\bar{\alpha}_{12}^2 q_3 + \bar{\beta}_{12}^2} \bar{g}_3(\xi) d\xi; \\ c_{jk}^* &= \bar{\alpha}_{2j}^* \bar{\beta}_{1j}^* - \bar{\alpha}_{1j}^* \bar{\beta}_{2j}^*; j, k = 1, 2. \end{aligned}$$

Припустимо, що виконана умова однозначної розв'язності даної крайової задачі: для $p = \sigma + i\tau$ із $\operatorname{Re} p = \sigma \geq \sigma_0$, де σ_0 - абсциса збіжності інтеграла Лапласа, та $\operatorname{Im} p = \tau \in (-\infty, +\infty)$ визначник алгебраїчної системи (3.196):

$$\Delta^*(p) \equiv (\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 + \bar{\beta}_{11}^1) Y_2^*(p) - (\bar{\alpha}_{21}^1 q_1 + \bar{\beta}_{21}^1) Y_1^*(p) \equiv (\bar{\alpha}_{12}^2 q_3 + \bar{\beta}_{12}^2) Z_2^*(p) - (\bar{\alpha}_{22}^2 q_3 + \bar{\beta}_{22}^2) Z_1^*(p) \neq 0. \quad (3.197)$$

Тут

$$Y_2^*(p) = (\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 + \bar{\beta}_{11}^1) \Delta_{j2}^* - (\bar{\alpha}_{22}^2 q_3 + \bar{\beta}_{22}^2) \Delta_{j1}^*; Z_j^*(p) = (\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 + \bar{\beta}_{11}^1) \Delta_{2j}^* - (\bar{\alpha}_{21}^1 q_1 + \bar{\beta}_{21}^1) \Delta_{1j}^*; j = 1, 2.$$

В результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (3.196), підстановки одержаних результатів для A_1, A_2, B_2 , та B_3 в формули (3.193) отримуємо єдиний розв'язок крайової задачі (3.189), (3.190):

$$u_j^*(p, z) = \int_{-\infty}^{l_1} \mathcal{H}_{j1}^*(p, z, \xi) \bar{g}_1(\xi) d\xi + \int_{l_1}^{l_2} \mathcal{H}_{j2}^*(p, z, \xi) \bar{g}_2(\xi) d\xi + \int_{l_2}^{\infty} \mathcal{H}_{j3}^*(p, z, \xi) \bar{g}_3(\xi) d\xi, j = \overline{1, 3}. \quad (3.198)$$

Тут елементи матриці функції впливу $[\mathcal{H}_{ij}^*(p, z, \xi)]$, $i, j = \overline{1, 3}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{11}^*(p, x, \xi) &= \frac{1}{q_1 \Delta^*(p)} \begin{cases} e^{-q_1(l_1-x)} [Y_2^*(p) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) - Y_1^*(p) \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi)], & -\infty < x < \xi < l_1, \\ e^{-q_1(l_1-\xi)} [Y_2^*(p) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 x) - Y_1^*(p) \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 x)], & -\infty < \xi < x < l_1, \end{cases} \\ \mathcal{H}_{12}^*(p, x, \xi) &= \frac{c_{21}^*}{\Delta^*(p)} e^{-q_1(l_1-x)} [(\bar{\alpha}_{22}^2 q_3 + \bar{\beta}_{22}^2) \Phi_{11}^2(q_2 l_2, q_2 \xi) - (\bar{\alpha}_{12}^2 q_3 + \bar{\beta}_{12}^2) \Phi_{21}^2(q_2 l_2, q_2 \xi)]; \\ \mathcal{H}_{13}^*(p, x, \xi) &= \frac{c_{21}^*(p) c_{22}^*(p)}{\Delta^*(p)} q_2 e^{-q_1(l_1-x)} e^{-q_3(\xi-l_2)}; \\ \mathcal{H}_{21}^*(p, x, \xi) &= \frac{c_{21}^*}{\Delta^*(p)} e^{-q_1(\xi-l_2)} [(\bar{\alpha}_{22}^2 q_3 + \bar{\beta}_{22}^2) \Phi_{11}^2(q_2 l_2, q_2 x) - (\bar{\alpha}_{12}^2 q_3 + \bar{\beta}_{12}^2) \Phi_{21}^2(q_2 l_2, q_2 x)]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{22}^*(p, x, \xi) &= \frac{1}{q_2 \Delta^*(p)} \left\{ [(\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 + \bar{\beta}_{11}^1) \Phi_{22}^1(q_2 l_1, q_2 x) - (\bar{\alpha}_{21}^1 q_1 - \bar{\beta}_{21}^1) \Phi_{12}^1(q_2 l_2, q_2 x)] [(\bar{\alpha}_{22}^2 q_3 - \bar{\beta}_{22}^2) \Phi_{11}^2(q_2 l_1, q_2 \xi) - (\bar{\alpha}_{12}^2 q_3 - \bar{\beta}_{12}^2) \Phi_{21}^2(q_2 l_2, q_2 \xi)], \quad l_1 < x < \xi < l_2; \right. \\
&\quad \left. - (\bar{\alpha}_{21}^1 q_1 - \bar{\beta}_{21}^1) \Phi_{12}^1(q_2 l_2, q_2 x) [(\bar{\alpha}_{22}^2 q_3 - \bar{\beta}_{22}^2) \Phi_{11}^2(q_2 l_1, q_2 x) - (\bar{\alpha}_{12}^2 q_3 - \bar{\beta}_{12}^2) \Phi_{21}^2(q_2 l_2, q_2 x)] \quad l_1 < \xi < x < l_2 \right\}; \quad (3.199) \\
\mathcal{H}_{23}^*(p, x, \xi) &= \frac{c_{23}^*}{\Delta^*(p)} e^{-q_3(\xi - l_2)} [(\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 - \bar{\beta}_{11}^1) \Phi_{22}^1(q_2 l_1, q_2 x) - (\bar{\alpha}_{21}^1 q_1 - \bar{\beta}_{21}^1) \Phi_{21}^1(q_2 l_1, q_2 x)]; \\
\mathcal{H}_{31}^*(p, x, \xi) &= \frac{c_{11}^*(p) c_{12}^*(p)}{\Delta^*(p)} q_2 e^{-q_1(l_1 - \xi)} e^{-q_3(x - l_2)}; \\
\mathcal{H}_{32}^*(p, x, \xi) &= \frac{c_{12}^*}{\Delta^*(p)} e^{-q_3(x - l_2)} [(\bar{\alpha}_{11}^1 q_1 - \bar{\beta}_{11}^1) \Phi_{22}^1(q_2 l_1, q_2 \xi) - (\bar{\alpha}_{21}^1 q_1 + \bar{\beta}_{21}^1) \Phi_{12}^1(q_2 l_1, q_2 \xi)]; \\
\mathcal{H}_{33}^*(p, x, \xi) &= \frac{1}{q_3 \Delta^*(p)} \begin{cases} e^{-q_3(\xi - l_2)} [Z_2^*(p) \Phi_{12}^2(q_3 l_2, q_3 x) - Z_1^*(p) \Phi_{22}^2(q_3 l_2, q_3 x)], \\ e^{-q_3(x - l_2)} [Z_2^*(p) \Phi_{12}^2(q_3 l_2, q_3 \xi) - Z_1^*(p) \Phi_{22}^2(q_3 l_2, q_3 \xi)], \end{cases} \\
&\quad \begin{matrix} l_2 < x < \xi < \infty \\ l_2 < \xi < x < \infty \end{matrix}.
\end{aligned}$$

Особливими точками функцій впливу $\mathcal{H}_{jk}^*(p, x, \xi)$ є точки галуження $p = -\gamma_j^2$ ($j = \overline{1, 3}$) та $p = \infty$. Внаслідок леми Жордана й теореми Коші отримуємо формули обчислення оригіналу елементів матриці функцій впливу:

$$\mathcal{H}_{jk}^*(t, x, \xi) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \text{Im}\{H_{jk}^*(e^{\pi i}(\beta^2 + \gamma^2), x, \xi)\} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} \beta d\beta; \quad j, k = \overline{1, 3}. \quad (3.200)$$

У формулах (3.199) $\gamma^2 = \max\{\gamma_1^2, \gamma_2^2, \gamma_3^2\}$. Виконуючи в формулах (3.200) зазначені операції при $q_j = ib_j(\beta) \equiv ia_j^{-1}(\beta^2 + k_j^2)^{1/2}$, де $k_j^2 = \gamma^2 - \gamma_j^2$, $j = \overline{1, 3}$, отримуємо:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{11}(t, z, \xi) &= \frac{2}{\pi} \int_0^\infty [f_{11,1}(\beta) \cos b_1(z - l_1) \cos b_2 \xi + f_{12,2}(\beta) \sin b_1(z - l_1) \cdot \\
&\quad \cdot \sin b_2 \xi - f_{12,3}(\beta) \sin b_1(z - l_1) \cos b_2 \xi + f_{12,4}(\beta) \cos b_1(z - l_1) \cdot \sin b_2 \xi] e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} b_3(\beta) \Omega_2(\beta) d\beta; \\
f_{11,1}(\beta) &= b_3 \omega_2(\beta) z_{11}(\beta) - \omega_1(\beta) z_{12}(\beta) \equiv b_1(b_3^2 z_{11}^2 + z_{12}^2) + b_3 e(\beta); \\
f_{11,2}(\beta) &= \omega_2(\beta) z_{22}(\beta) + b_3 \omega_1(\beta) z_{21}(\beta) \equiv b_3^2 z_{21}^2 + z_{22}^2 + b_1 b_3 e(\beta); \\
f_{11,3}(\beta) &= b_3 \omega_1(\beta) z_{11}(\beta) + \omega_2(\beta) z_{12}(\beta) \equiv z_{12} z_{22} + b_3^2 z_{11} z_{21} \equiv b_1^{-1}(b_3 z_{21} \omega_2 - z_{22} \omega_1); \\
\Omega_2(\beta) &= \beta \cdot b_3^{-1}(\omega_1^2(\beta) + \omega_2^2(\beta)); e(\beta) = z_{11} z_{22} - z_{12} z_{21} = c_{11,1} c_{11,2} c_{21,1} c_{21,2} b_2^2(\beta) > 0;
\end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_{12}(t, z, \xi) = -\frac{2}{\pi} c_{21,1} \int_0^\infty \{f_{12,1}(\beta) \cos b_1(z-l_1) \cos b_2 \xi + f_{12,2}(\beta) \sin b_1(z-l_1) \sin b_2 \xi -$$

$$-f_{12,3}(\beta) \sin b_1(z-l_1) \cos b_2 \xi - f_{12,4}(\beta) \cos b_1(z-l_1) \sin b_2 \xi\} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} b_3 \Omega_2(\beta) d\beta; \quad (3.201)$$

$$f_{12,1}(\beta) = b_3 \omega_2(\beta) \bar{z}_{12} - \omega_1 \bar{z}_{22}; f_{12,2}(\beta) = \omega_2 \bar{z}_{21} + b_3 \omega_1 \bar{z}_{11}; f_{12,3}(\beta) = b_3 \omega_1(\beta) \bar{z}_{12} + \omega_2 \bar{z}_{22};$$

$$f_{12,4}(\beta) = b_3 \omega_1 \bar{z}_{12} + \omega_2 \bar{z}_{22}; \bar{z}_{1j} = \tilde{\alpha}_{12}^2 v_{21}^{2j} - \tilde{\alpha}_{22}^2 v_{11}^{2j}, \bar{z}_{2j} = \tilde{\beta}_{12}^2 v_{21}^{2j} - \tilde{\beta}_{22}^2 v_{11}^{2j}, j=1,2;$$

$$\mathcal{H}_{13}(t, z, \xi) = -\frac{2}{\pi} c_{21,1} c_{21,2} \int_0^\infty \{\omega_1(\beta) \cos b_1(z-l_1) \cos b_3(\xi-l_2) + \omega_1(\beta) \sin b_1(z-l_1) \sin b_3(\xi-l_2) +$$

$$+ \omega_2(\beta) \sin b_1(z-l_1) \cos b_3(\xi-l_2) - \omega_2(\beta) \sin b_3(\xi-l_2) \cos b_1(z-l_1)\} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} b_2 b_3 \Omega_2(\beta) d\beta;$$

$$H_{22}(t, z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \{f_{22,1}(\beta) \cos b_2 z \cos b_2 \xi + f_{22,2}(\beta) \sin b_2 z \sin b_2 \xi -$$

$$-f_{22,3}(\beta) \cos b_2(z+\xi)\} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} b_2^{-1} b_3 \Omega_2(\beta) d\beta; \quad (3.202)$$

$$f_{22,1}(\beta) = b_2 [b_3 c_{11,2} c_{21,2} (b_1^2 y_{12}^2 + y_{22}^2) + b_1 c_{11,1} c_{21,1} (b_3^2 \bar{z}_{12}^2 + \bar{z}_{22}^2)]; f_{22,2}(\beta) = b_2 [b_3 c_{11,2} c_{21,2} (b_1^2 y_{11}^2 + y_{21}^2) + b_1 c_{11,1} c_{21,1} (b_3^2 \bar{z}_{11}^2 + \bar{z}_{21}^2)];$$

$$f_{22,3}(\beta) = b_2(\beta) [b_3 c_{11,1} c_{21,1} (b_3^2 \bar{z}_{11} \bar{z}_{12} + \bar{z}_{21} \bar{z}_{22}) + b_1 c_{11,2} c_{21,2} (b_1^2 y_{11} y_{12} + y_{21} y_{22})];$$

$$y_{1j} = \tilde{\alpha}_{11}^1 v_{22}^{1j} - \tilde{\alpha}_{21}^1 v_{12}^{1j}; y_{2j} = \tilde{\beta}_{11}^1 v_{22}^{1j} - \tilde{\beta}_{21}^1 v_{12}^{1j}; j=1,2;$$

$$\mathcal{H}_{23}(t, z, \xi) = \frac{2}{\pi} c_{21,2} \int_0^\infty \{-f_{23,1}(\beta) \cos b_2 z \cos b_3(\xi-l_2) + f_{23,2}(\beta) \sin b_2 z \sin b_3(\xi-l_2) +$$

$$+f_{23,3}(\beta) \cos b_2 z \sin b_3(\xi-l_2) + f_{23,4}(\beta) \sin b_2 z \cos b_3(\xi-l_2)\} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} b_2^{-1} b_3 \Omega_2(\beta) d\beta;$$

$$f_{23,1} = \omega_1 y_{22} + b_1 \omega_2 y_{12}; f_{23,2} = \omega_2 y_{22} + b_1 \omega_1 y_{12}; f_{23,3} = b_1 \omega_1 y_{11} + \omega_2 y_{21}; f_{23,4} = b_1 \omega_2 y_{11} + \omega_1 y_{21};$$

$$f_{23,5} = \omega_1 y_{22} - b_1 \omega_2 y_{12}; f_{23,6} = b_1 \omega_2 y_{11} + \omega_1 y_{21}; f_{23,7} = b_1 \omega_1 y_{11} + \omega_2 y_{21}; f_{23,8} = b_1 \omega_2 y_{11} + \omega_1 y_{21};$$

$$\mathcal{H}_{33}(t, z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty [b_3 f_{33,1}(\beta) \cos b_3(z-l_2) \cos b_3(\xi-l_2) + f_{33,2}(\beta) \sin b_3(z-l_2) \sin b_3(\xi-l_2) -$$

$$-b_3 f_{33,3}(\beta) \sin b_3(z+\xi-2l_2)] e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} \Omega_2(\beta) d\beta;$$

$$f_{33,1}(\beta) = b_1 (b_1^2 z_{11}^2 + z_{21}^1) b_1 e(\beta) \equiv b_1 z_{11} \omega_2 + \omega_1 z_{21}; f_{33,2}(\beta) = z_{22}^2 + b_1^2 z_{12}^2 + b_1 b_3 e(\beta) \equiv \omega_2 z_{22} - b_1 \omega_1 z_{12};$$

$$f_{33,3}(\beta) = \omega_2 z_{21} - b_1 \omega_1 z_{11} = (\omega_1 z_{22} + b_1 z_{12} \omega_2) b_3^{-1} = z_{21} z_{22} + b_1^2 z_{11} z_{12}.$$

Тут

$$z_{11} = \bar{z}_{11} y_{12} - \bar{z}_{12} y_{11}; z_{21} = \bar{z}_{11} y_{22} - \bar{z}_{12} y_{21}; z_{12} = \bar{z}_{21} y_{12} - \bar{z}_{22} y_{11}; z_{22} = \bar{z}_{21} y_{22} - \bar{z}_{22} y_{21};$$

$$\omega_1 = b_3 \bar{z}_{11} y_{22} - b_1 \bar{z}_{21} y_{12} - (b_3 y_{21} \bar{z}_{12} - b_1 y_{11} \bar{z}_{22}) \equiv b_3 z_{21} - b_1 z_{12}(\beta)$$

$$\omega_2(\beta) = \bar{z}_{22}(\beta) + b_1 b_3 z_{11}(\beta) \equiv \bar{z}_{21} y_{22} + b_1 b_3 z_{11} y_{12} - (\bar{z}_{22} y_{21} + b_1 b_3 y_{11} \bar{z}_{12}).$$

Визначимо величини та функції:

$$\sigma_1 = \frac{c_{11,1} c_{11,2}}{c_{21,1} c_{21,2} a_1^2}, \sigma_2 = \frac{c_{11,2}}{c_{21,2} a_2^2}, \sigma_3 = \frac{1}{a_3^2};$$

$$\begin{aligned}
V_1(z, \beta) &= A_1 \cos b_1(z - l_1) + B_1 \sin b_1(z - l_1) + i(C_1 \cos b_1(z - l_1) + D_1 \sin b_1(z - l_1)); \\
V_2(z, \beta) &= A_2 \cos b_2 z + B_2 \sin b_2 z + i(C_2 \cos b_2 z + D_2 \sin b_2 z); \\
V_3(z, \beta) &= A_3 \cos b_3(z - l_2) + B_3 \sin b_3(z - l_2) + i(C_3 \cos b_3(z - l_2) + D_3 \sin b_3(z - l_2)).
\end{aligned} \tag{3.203}$$

Якщо вимагати виконання рівностей

$$\mathcal{H}_{jk}(t, z, \xi) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} \operatorname{Re}[V_j(z, \beta) \overline{V_k(\xi, \beta)}] \cdot \Omega_2(\beta) d\beta \sigma_k D_k; j, k = \overline{1, 3}, \tag{3.204}$$

то для визначення дванадцяти невідомих A_j, B_j, C_j, D_j ($j = 1, 2, 3$) отримуємо алгебраїчну систему з 21-го рівняння:

$$\begin{aligned}
A_1^2 + C_1^2 &= \frac{c_{21,1} c_{21,2}}{c_{11,1} c_{11,2}} b_3 f_{11,1}(\beta) \equiv \alpha_1 b_1^{-1} f_{11,1}(\beta); \\
B_1^2 + D_1^2 &= \frac{c_{21,1} c_{21,2}}{c_{11,1} c_{11,2} b_3 b_1} f_{11,2}(\beta) \equiv \alpha_1 b_1^{-1} f_{11,2}(\beta); \\
A_1 B_1 + C_1 D_1 &= \frac{c_{21,1} c_{21,2}}{c_{11,1} c_{11,2}} b_3 f_{11,3}(\beta) \equiv -\alpha_1 f_{11,3}(\beta); \\
A_1 A_2 + C_1 C_2 &= \frac{c_{21,2}}{c_{11,2}} b_3 c_{12,1} f_{12,1}(\beta) \equiv \alpha_2 f_{12,1}(\beta); \\
A_1 B_2 + C_1 D_2 &= -\frac{c_{21,2}}{c_{11,2}} b_3 c_{12,1} f_{12,4}(\beta) \equiv -\alpha_2 f_{12,4}(\beta); \\
B_1 A_2 + D_1 C_2 &= -\frac{c_{21,2}}{c_{11,2}} b_3 c_{21,1} f_{12,3}(\beta) \equiv -\alpha_2 f_{12,3}(\beta); \\
B_1 B_2 + D_1 D_2 &= \frac{c_{21,2}}{c_{11,2}} b_3 c_{21,1} f_{12,2}(\beta) \equiv \alpha_2 f_{12,2}(\beta); \\
A_1 A_3 + C_1 C_3 &= -c_{21,1} c_{21,2} b_2 b_3 \omega_1(\beta) \equiv -\alpha_3 \omega_1(\beta); \\
A_2^2 + C_2^2 &= \frac{c_{21,2} b_3}{c_{11,2} b_2} f_{22,1}(\beta) \equiv \alpha_4 f_{22,1}(\beta); \\
B_2^2 + D_2^2 &= \frac{c_{21,2} b_3}{c_{11,2} b_2} f_{22,2}(\beta) \equiv \alpha_4 f_{22,2}(\beta); \\
A_2 B_2 + C_2 D_2 &= \frac{c_{21,2} b_3}{c_{11,2} b_2} f_{22,3}(\beta) \equiv -\alpha_4 f_{22,3}(\beta);
\end{aligned} \tag{3.205}$$

$$\begin{aligned}
A_2 A_3 + C_2 C_3 &= -c_{21,2} b_3 f_{23,1}(\beta); \\
A_2 B_3 + C_2 D_3 &= c_{21,2} b_3 f_{23,3}(\beta); \\
B_2 A_3 + D_2 C_3 &= c_{21,2} b_3 f_{23,4}(\beta); \\
B_2 B_3 + D_2 D_3 &= c_{21,2} b_3 f_{23,2}(\beta); \\
A_3^2 + C_3^2 &= b_3 f_{33,1}(\beta); \\
B_3^2 + D_3^2 &= f_{33,2}(\beta); \\
A_3 B_3 + C_3 D_3 &= -b_3 f_{33,3}(\beta). \\
A_1 B_3 + C_1 D_3 &= c_{21,1} c_{21,2} b_2 b_3 \omega_2(\beta) \equiv \alpha_3 \omega_2(\beta); \\
B_1 A_3 + D_1 C_3 &= -c_{21,1} c_{21,2} b_2 b_3 \omega_2(\beta) \equiv -\alpha_3 \omega_2(\beta); \\
B_1 B_3 + D_1 D_3 &= -c_{21,1} c_{21,2} b_2 b_3 \omega_1(\beta) \equiv -\alpha_3 \omega_1(\beta);
\end{aligned} \tag{3.206}$$

У результаті дослідження системи (3.203), (3.204) отримуємо твердження.

Лема 3.4.1 Якщо покласти $C_1=0$ і з групи рівнянь (3.205) визначити коефіцієнти $A_1, B_1, D_1, A_j, B_j, C_j, D_j$, ($j=2,3$), то всі рівняння групи (3.206) перетворюються в тотожні рівності.

Доведення: При $C_1=0$ із системи рівнянь системи (3.205) знаходимо:

$$\begin{aligned}
A_1 &= (\alpha_1 f_{11,1}(\beta))^{1/2}; B_1 = -\alpha_1 f_{11,3}(\beta) (\alpha_1 f_{11,1}(\beta))^{1/2}; \\
D_1 &= (b_1 f_{11,1}(\beta))^{1/2} [\alpha_1 (f_{11,1} f_{11,2} - b_1 f_{11,3}^2)]^{1/2}; \\
A_2 &= \alpha_2 f_{12,1} (\alpha_1 f_{11,1})^{1/2}; B_2 = -\alpha_2 f_{12,4}(\beta) (\alpha_1 f_{11,1})^{1/2}; \\
C_2 &= \frac{\alpha_2 b_1^{1/2} (f_{11,3} f_{12,1} - f_{11,1} f_{12,3})}{[\alpha_1 f_{11,1} (f_{11,1} f_{11,2} - b_1 f_{11,3}^2)]^{1/2}}; \\
D_2 &= \frac{\alpha_2 b_1^{1/2} (f_{11,1} f_{12,2} - f_{11,3} f_{12,4})}{[\alpha_1 f_{11,1} (f_{11,1} f_{11,2} - b_1 f_{11,3}^2)]^{1/2}}; \\
A_3 &= -\alpha_3 \omega_1(\beta) (\alpha_1 f_{11,3})^{1/2}; B_3 = \alpha_3 \omega_2(\beta) (\alpha_1 f_{11,3})^{1/2}; \\
C_3 &= -\frac{\alpha_3 b_1^{1/2} (f_{11,1} \omega_2 + f_{11,3} \omega_2)}{\sqrt{\alpha_1 f_{11,1} (f_{11,1} f_{11,2} - b_1 f_{11,3}^2)}}; \\
D_3 &= -\frac{\alpha_3 b_1^{1/2} (f_{11,3} \omega_2 + f_{11,1} \omega_2)}{\sqrt{\alpha_1 f_{11,1} (f_{11,1} f_{11,2} - b_1 f_{11,3}^2)}}.
\end{aligned} \tag{3.207}$$

Покажемо тепер, що при такому виборі коефіцієнтів A_j, B_j, C_j, D_j , ($j=1,3$) рівняння групи (3.206) перетворюється в тотожності. Безпосередньо маємо:

$$\begin{aligned}
A_2 + C_2 &= \alpha_2^2 \alpha_1^{-1} (f_{11,1} f_{11,2} - b_1 f_{11,3}^2)^{-1} [f_{12,1} (f_{11,2} f_{12,1} - \\
&- f_{11,2} f_{12,1} - b_1 f_{11,3} f_{12,3}) + b_1 f_{12,3} (f_{11,1} f_{12,3} - f_{12,1} f_{11,3})]
\end{aligned} \tag{3.208}$$

Оскільки

$$\begin{aligned} f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{12,3}^2 &= b_3e(\beta)(\omega_1^2 - \omega_2^2), \quad f_{11,2}f_{12,3} - b_1f_{11,3}f_{12,3} = c_{11,2}c_{21,2}b_2b_3(\omega_1^2 - \omega_2^2)y_{22}, \\ f_{11,1}f_{12,3} - f_{12,1}f_{11,3} &= -c_{11,2}c_{21,2}b_2b_3(\omega_1^2 - \omega_2^2)y_{12}, \end{aligned} \quad (3.209)$$

то, підставивши рівності (3.209) в рівність (3.208), одержуємо

$$A_2^2 + C_2^2 = \frac{\alpha_2^2 b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2)}{\alpha_2^2 b_3 (\omega_1^2 + \omega_2^2) e(\beta)} [f_{12,1}y_{22} - b_1f_{12,3}y_{12}] \equiv \alpha_4 f_{22,1}(\beta).$$

Аналогічно маємо:

$$B_2^2 + D_2^2 = \alpha_4 (y_{21}f_{12,4} - b_1f_{12,2}y_{11}) \equiv \alpha_4 f_{22,2}(\beta);$$

$$A_2B_2 + C_2D_2 = -\alpha_4 (y_{21}f_{12,4} - b_1f_{12,2}y_{11}) \equiv -\alpha_4 f_{22,3}(\beta);$$

$$\begin{aligned} A_3^2 + C_3^2 &= \alpha_3^2 \alpha_1^{-1} (f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{11,3}^2)^{-1} \{ \omega_1 (\omega_1 f_{11,2} + b_1 \omega_2 f_{11,3}) + \\ &+ b_1 \omega_2 (f_{11,2} \omega_2 + \omega_1 f_{11,3}) \} = b_3 (\omega_1 z_{21} + b_1 z_{11} \omega_2) \equiv b_3 f_{33,1}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_3^2 + D_3^2 &= \alpha_3^2 \alpha_1^{-1} (f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{11,3}^2)^{-1} \{ \omega_2 (\omega_2 f_{11,2} - b_1 \omega_1 f_{11,3}) + \\ &+ b_1 \omega_1 (f_{11,1} \omega_1 - \omega_2 f_{11,3}) \} = \omega_2 z_{22} + b_1 z_{12} \omega_1 \equiv f_{33,2}(\beta); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_3B_3 + C_3D_3 &= \alpha_3^2 \alpha_1^{-1} (f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{11,3}^2)^{-1} \{ \omega_1 (\omega_2 f_{11,2} - b_1 \omega_1 f_{11,3}) + \\ &+ b_1 \omega_2 (f_{11,3} \omega_2 - \omega_1 f_{11,3}) \} = -(\omega_1 z_{22} + b_1 z_{12} \omega_2) \equiv b_3 f_{33,3}(\beta); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_2A_3 + C_2C_3 &= -\alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^{-1} (f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{11,3}^2)^{-1} [\omega_1 (f_{11,2}f_{12,1} - b_1f_{11,3}f_{12,3}) + \\ &+ b_1 \omega_2 (f_{11,3}f_{12,1} - f_{11,1}f_{12,3})] = -\alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^{-1} (f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{11,3}^2) b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) \times \\ &\times (\omega_1 y_{22} - b_1 \omega_2 y_{12}) \equiv -c_{21,2} b_3 f_{23,1}(\beta); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} A_2B_3 + C_2D_3 &= \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^{-1} (f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{11,3}^2)^{-1} \{ \omega_2 (f_{11,2}f_{12,1} - b_1f_{11,3}f_{12,3}) + \\ &+ b_1 \omega_2 (f_{11,1}f_{12,3} - f_{11,3}f_{12,1}) \} = \frac{\alpha_2 \alpha_3 b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2)}{\alpha_1 b_3 e(\beta) (\omega_1^2 + \omega_2^2)} (\omega_2 y_{22} - b_1 \omega_1 y_{12}) \equiv \\ &\equiv c_{21,2} b_3 f_{23,3}(\beta); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_2A_3 + D_2C_3 &= \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^{-1} (f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{11,3}^2)^{-1} \{ \omega_1 (f_{11,2}f_{12,4} - b_1f_{11,3}f_{12,2}) + \\ &+ b_1 \omega_2 (f_{11,3}f_{12,4} - f_{11,1}f_{12,2}) \} = \frac{\alpha_2 \alpha_3 b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2)}{\alpha_1 b_3 e(\beta) (\omega_1^2 + \omega_2^2)} (\omega_1 y_{21} - b_1 \omega_2 y_{11}) \equiv \\ &\equiv c_{21,2} b_3 f_{23,4}(\beta); \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} B_2B_3 + D_2D_3 &= \alpha_2 \alpha_3 \alpha_1^{-1} (f_{11,1}f_{11,2} - b_1f_{11,3}^2)^{-1} \{ \omega_2 (f_{11,3}f_{12,4} - b_1f_{11,1}f_{12,2}) - \\ &- \omega_2 (f_{11,2}f_{12,4} - b_1f_{11,3}f_{12,2}) \} = \frac{\alpha_2 \alpha_3 b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2)}{\alpha_1 b_3 e(\beta) (\omega_1^2 + \omega_2^2)} (b_1 \omega_1 y_{11} - \omega_2 y_{21}) \equiv \\ &\equiv c_{21,2} b_3 f_{23,2}(\beta); \end{aligned}$$

Цим доведення леми звершене.

У результаті підстановки коефіцієнтів $A_j, B_j, C_j, D_j, (j=1,2,3)$, визначених формулами (3.207), у рівності (3.203) одержуємо структуру компонентів спектральної вектор-функції:

$$\begin{aligned} V_1(x, \beta) &= (\alpha_1 f_{11,1}^{-1})^{1/2} \{ f_{11,1} \cos b_1(x-l_1) - f_{11,3} \sin b_1(x-l_1) + \\ &+ [b_1^{-1} b_3 e(\beta)(\omega_1^2 + \omega_2^2)]^{1/2} \sin b_1(x-l_1) \}; \\ V_2(x, \beta) &= \alpha_2 (\alpha_1 f_{11,1})^{-1/2} (f_{12,1} \cos b_2 x - f_{12,4} \sin b_2 x) + i c_{21,2} b_3 [b_1 f_{11,1}^{-1} (\omega_1^2 + \omega_2^2)]^{1/2} (y_{12} \cos b_2 x - y_{11} \sin b_2 x); \\ V_3(x, \beta) &= \alpha_3 (\alpha_1 f_{11,1})^{1/2} (\omega_2(\beta) \sin b_3(x-l_2) - \omega_1(\beta) \cos b_3(x-l_2)) + \\ &+ i [b_1 f_{11,1}^{-1} (\omega_1^2 + \omega_2^2)]^{1/2} (z_{12} \sin b_3(x-l_2) - b_3 z_{11} \cos b_3(x-l_2)). \end{aligned} \quad (3.210)$$

Тут

$$\begin{aligned} f_{11,3} f_{12,4} - f_{11,1} f_{12,2} &= b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) y_{11}; \quad f_{11,1} f_{11,2} - b_1 f_{11,3}^2 = b_3 e(\beta) (\omega_1^2 + \omega_2^2); \\ f_{11,2} f_{12,1} - b_1 f_{11,3} f_{12,3} &= b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) y_{22}; \quad f_{12,1} f_{11,3} - f_{11,1} f_{12,3} = b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) y_{12}; \\ f_{11,2} f_{12,4} - b_1 f_{11,3} f_{12,2} &= b_2 b_3 c_{11,2} c_{21,2} (\omega_1^2 + \omega_2^2) y_{21}; \quad y_{21} f_{12,4} - b_1 y_{11} f_{12,2} = f_{22,2}; \\ y_{22} f_{12,1} - b_1 y_{12} f_{12,3} &= f_{22,1}; \quad y_{21} f_{21,1} - b_1 y_{11} f_{12,3} = f_{22,3}. \end{aligned} \quad (3.211)$$

Лема 3.4.2: Функції $V_j(x, \beta)$, визначені формулами (3.210) задовольняють диференціальне рівняння

$$\left[\frac{d^2}{dz^2} + b_j^2(\beta) \right] V_j(z, \beta) = 0, \quad j = \overline{1,3} \quad (3.212)$$

та інтерфейсні умови

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{k1}^m \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{k1}^m \right) V_m(z, \beta) - \left(\tilde{\alpha}_{k2}^m \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{k2}^m \right) V_{m+1}(z, \beta) \right] \Big|_{z=l_m} = 0; \quad k, m = 1, 2. \quad (3.213)$$

Доведення: Оскільки функції $V_j(z, \beta)$ є лінійними комбінаціями тригонометричних функцій $\cos b_j z$ та $\sin b_j z$ ($\cos b_j(z-l_m)$ та $\sin b_j(z-l_m)$), то рівняння (3.212) задовольняються. Покажемо справедливості рівностей (3.213). Оскільки $V_j(z, \beta) = V_{j1}(z, \beta) + i V_{j2}(z, \beta), j = \overline{1,3}$, то треба показати виконання інтерфейсних умов (3.214) і для функцій $V_{j1}(z, \beta) = \operatorname{Re} V_j(z, \beta)$ і для функцій $V_{j2}(z, \beta) = \operatorname{Im} V_j(z, \beta), j = \overline{1,3}$. Безпосередньо отримуємо

$$\begin{aligned}
\left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) V_{11}(z, \beta) \Big|_{z=l_1} &= \frac{\alpha_1}{\sqrt{\alpha_1 f_{11,1}}} (\tilde{\beta}_{11}^1 f_{11,1} - \tilde{\alpha}_{11}^1 b_1 f_{11,3}); \\
\left(\tilde{\alpha}_{12}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^1 \right) V_{21}(z, \beta) \Big|_{z=l_1} &= \frac{\alpha_2}{\sqrt{\alpha_1 f_{11,1}}} (v_{12}^{11} f_{12,1} - v_{12}^{12} b_1 f_{12,4}) = \\
&= \frac{\alpha_2 c_{11,1}^{-1}}{\sqrt{\alpha_1 f_{11,1}}} [(\tilde{\alpha}_{11}^1 z_{22} - \tilde{\beta}_{11}^1 z_{12}) \omega_1 - b_3 \omega_2 (\tilde{\alpha}_{11}^1 z_{21} - \tilde{\beta}_{11}^1 z_{11})] \equiv \frac{\alpha_1}{\sqrt{\alpha_1 f_{11,1}}} [\tilde{\beta}_{11}^1 f_{11,1}(\beta) - \tilde{\alpha}_{11}^1 b_1 f_{11,3}(\beta)]; \\
\left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) V_{12}(z, \beta) \Big|_{z=l_1} &= \tilde{\alpha}_{11}^1 [b_1 b_3 e(\beta) (\omega_1^2 + \omega_2^2)]^{1/2} (\alpha_1 f_{11,1})^{1/2}; \\
\left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) V_{22}(z, \beta) \Big|_{x=l_1} &= c_{21,2} b_3 [b_1 f_{11,1}^{-1} (\omega_1^2 + \omega_2^2)]^{1/2} [y_{12} v_{12}^{12} (b_2 l_1)] = \\
&= c_{21,1} c_{21,2} b_2 b_3 \tilde{\alpha}_{11}^1 [b_1 f_{11,1}^{-1} (\omega_1^2 + \omega_2^2)]^{1/2}.
\end{aligned}$$

Оскільки $b_1 b_3 \alpha_1 e(\beta) = b_1 b_2^2 b_3^2 c_{21,1}^2 c_{21,1}^2$, то справджується рівність

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) V_{12}(z, \beta) \Big|_{z=l_1} = \left(\tilde{\alpha}_{12}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^1 \right) V_{22}(z, \beta) \Big|_{z=l_1}.$$

Отже, має місце тотожна рівність:

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) V_1(z, \beta) - \left(\tilde{\alpha}_{12}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^1 \right) V_2(z, \beta) \Big|_{z=l_1} \equiv 0.$$

Аналогічно доводиться тотожність $\left(\tilde{\alpha}_{21}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{21}^1 \right) V_1(z, \beta) - \left(\tilde{\alpha}_{22}^1 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^1 \right) V_2(z, \beta) \Big|_{z=l_1} \equiv 0$.

Покажемо виконання інтерфейсної умови при $z = l_2$. Підраховуючи, одержимо:

$$\begin{aligned}
\left(\tilde{\alpha}_{11}^2 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^2 \right) V_{21}(z, \beta) \Big|_{z=l_2} &= \alpha_2 (\alpha_1 f_{11,1})^{-1/2} (v_{11}^{21} f_{12,1} v_{11}^{22} f_{12,4}); \\
\left(\tilde{\alpha}_{12}^2 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^2 \right) V_{31}(z, \beta) \Big|_{z=l_2} &= \alpha_3 (\alpha_1 f_{11,1})^{-1/2} (\tilde{\alpha}_{12}^2 b_3 \omega_2(\beta) - \tilde{\beta}_{11}^2 \omega_1(\beta)); \\
\left(\tilde{\alpha}_{11}^2 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{11}^2 \right) V_{22}(z, \beta) \Big|_{z=l_2} &= c_{21,2} b_3 [b_1 f_{11,1}^{-1} (\omega_1^2 + \omega_2^2)]^{1/2} (y_{12} v_{11}^{21} - y_{11} v_{11}^{22}); \\
\left(\tilde{\alpha}_{12}^2 \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^2 \right) V_{32}(z, \beta) \Big|_{z=l_2} &= b_3 [b_1 f_{11,1}^{-1} (\omega_1^2 + \omega_2^2)]^{1/2} (\tilde{\alpha}_{12}^2 z_{12} - \tilde{\beta}_{12}^2 z_{11}).
\end{aligned}$$

Оскільки

$$\alpha_2(v_{11}^{21}f_{12,1}v_{11}^{22}f_{12,4}) = \alpha_2c_{11,2}b_2(\tilde{\alpha}_{12}^2b_3\omega_2 - \tilde{\beta}_{12}^2\omega_1) = \alpha_3(\tilde{\alpha}_{12}^2b_3\omega_2 - \tilde{\beta}_{12}^2\omega_1),$$

$$y_{12}v_{11}^{21} - y_{11}v_{11}^{22} = \tilde{\alpha}_{21}^1\delta_{11} - \tilde{\alpha}_{11}^1\delta_{21}; \tilde{\alpha}_{12}^2z_{12} - \beta_{12}^2z_{11} = c_{21,1}(\tilde{\alpha}_{21}^1\delta_{11} - \tilde{\alpha}_{11}^1\delta_{21}),$$

$$\text{то отримуємо: } \left(\tilde{\alpha}_{11}^2 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{11}^2 \right) V_{2j}(x, \beta) \Big|_{x=l_2} = \left(\tilde{\alpha}_{12}^2 \frac{d}{dx} + \tilde{\beta}_{12}^2 \right) V_{3j}(x, \beta) \Big|_{x=l_2}, j=1,2.$$

Отже, перша із інтерфейсних умов в $z = l_2$ справджується. Аналогічно показується, що справджується і друга інтерфейсна умова в $z = l_2$. Цим доведення леми завершується.

Із коефіцієнтів, що беруть участь у формулюванні інтерфейсних умов

$$(3.189), \text{ складемо матриці } A_{j1,k} = \begin{bmatrix} \alpha_{1j}^k & \beta_{1j}^k \\ \alpha_{2j}^k & \beta_{2j}^k \end{bmatrix}, A_{j2,k} = \begin{bmatrix} \delta_{1j}^k & \gamma_{1j}^k \\ \delta_{2j}^k & \gamma_{2j}^k \end{bmatrix}, j,k=1,2.$$

Визначимо числа:

$$c_{j1,k} = -\det A_{j1,k} \equiv \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k, j=1,2; c_{j2,k} = -\det A_{j2,k} \equiv \delta_{2j}^k \gamma_{1j}^k - \delta_{1j}^k \gamma_{2j}^k, k=1,2;$$

$$c_{11,12}^{12,k} = \alpha_{11}^k \gamma_{21}^k - \alpha_{21}^k \gamma_{11}^k, c_{11,12}^{21,k} = \beta_{11}^k \delta_{21}^k - \beta_{21}^k \delta_{11}^k; c_{21,22}^{12,k} = \alpha_{12}^k \gamma_{22}^k - \alpha_{22}^k \gamma_{12}^k, c_{21,22}^{21,k} = \beta_{12}^k \delta_{22}^k - \beta_{22}^k \delta_{12}^k.$$

Припустимо, що справджуються відношення

$$c_{11,k}c_{21,k} > 0, c_{j2,k} = 0, c_{11,12}^{12,k} = c_{11,12}^{21,k}, c_{21,22}^{12,k} = c_{21,22}^{21,k}. \quad (3.214)$$

Повертаючись в рівностях (3.207) до оригіналу, одержуємо розв'язок параболічної задачі (3.188)-(3.190):

$$\begin{aligned} u_j(t,z) &= \int_{-\infty}^{l_1} \mathcal{H}_{j1}(t,z,\xi) \bar{g}_1(\xi) d\xi + \int_{l_1}^{l_2} \mathcal{H}_{j2}(t,z,\xi) \bar{g}_2(\xi) d\xi + \int_{l_2}^{\infty} \mathcal{H}_{j3}(t,z,\xi) \bar{g}_3(\xi) d\xi = \\ &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} \operatorname{Re} \left[V_j(z, \beta) \left(\int_{-\infty}^{l_1} g_1(\xi) \overline{V_1(\xi, \beta)} \sigma_1 d\xi + \int_{l_1}^{l_2} g_2(\xi) \overline{V_2(\xi, \beta)} \sigma_2 d\xi + \int_{l_2}^{\infty} g_3(\xi) \overline{V_3(\xi, \beta)} \sigma_3 d\xi \right) \right] \times \\ &\times \Omega_2(\beta) d\beta, j=1,3. \end{aligned} \quad (3.215)$$

Внаслідок початкових умов (3.188) маємо інтегральні зображення:

$$\begin{aligned} g_1(z) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[V_1(z, \beta) \int_{-\infty}^{l_1} g_1(\xi) \overline{V_1(\xi, \beta)} \sigma_1 d\xi \right] \Omega_2(\beta) d\beta, z \in (-\infty, l_1), \\ g_2(z) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[V_2(z, \beta) \int_{-\infty}^{l_1} g_2(\xi) \overline{V_2(\xi, \beta)} \sigma_2 d\xi \right] \Omega_2(\beta) d\beta, z \in (l_1, l_2), \\ g_3(x) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[V_3(x, \beta) \int_{l_2}^{\infty} g_1(\xi) \overline{V_3(\xi, \beta)} \sigma_3 d\xi \right] \Omega_2(\beta) d\beta, x \in (l_2, \infty). \end{aligned} \quad (3.216)$$

Поклавши

$$\sigma(z) = \sigma_1 \theta(l_1 - z) + \sigma_2 \theta(z - l_1) \theta(l_2 - z) + \sigma_3 \theta(z - l_2),$$

$$g(z) = g_1(z) \theta(l_1 - z) + g_2(z) \theta(z - l_1) \theta(l_2 - z) + g_3(x) \theta(z - l_2),$$

$$V(z, \beta) = V_1(z, \beta) \theta(l_1 - z) + V_2(z, \beta) \theta(z - l_1) \theta(l_2 - z) + V_3(z, \beta) \theta(z - l_2),$$

інтегральні зображення матимуть вигляд:

$$g(z) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Re} \left[V(z, \beta) \int_{-\infty}^\infty g(\xi) \overline{V(\xi, \beta)} \sigma d\xi \right] \Omega_2(\beta) d\beta. \quad (3.217)$$

Математичним обґрунтуванням інтегрального зображення (3.217) є твердження.

Теорема 3.4.1 (про інтегральне зображення): *Якщо функція $g(x)$ неперервна, абсолютно сумовна й має обмежену варіацію на множині $(-\infty, +\infty)$, то при виконанні співвідношень (3.214) для будь-якого $x \in I_2$ справджується інтегральне зображення (3.217).*

Ця теорема є наслідком властивостей ядра Коші [21].

Інтегральне зображення (3.217) визначає пряме F_2 і обернене F_2^{-1} інтегральні перетворення Фур'є із спектральним параметром для необмеженого неоднорідного трискладового середовища:

$$F_2[g(z)] = \int_{-\infty}^\infty g(z) \overline{V(z, \beta)} \sigma(z) dz \equiv \tilde{g}(\beta), \quad (3.218)$$

$$F_2^{-1}[\tilde{g}(\beta)] = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \operatorname{Re}[\tilde{g}(\beta) V(z, \beta)] \Omega_2(\beta) d\beta \equiv g(z). \quad (3.219)$$

Теорема 3.5.2: *Якщо вектор-функція $g(x) \in C^{(3)}(I_2)$ задовольняє умови обмеження*

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \frac{d^k}{dz^k} g_1(z) = 0, \lim_{x \rightarrow +\infty} \frac{d^k}{dz^k} g_3(z) = 0, k = 0, 1, \quad (3.220)$$

інтерфейсні умови

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) g_k(z) - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) g_{k+1}(z) \right] \Big|_{z=l_k} = 0; j, k = 1, 2. \quad (3.221)$$

та мають місце рівності $c_{j2,k} = 0, c_{j1,j2}^{12,k} = c_{j1,j2}^{21,k}, j, k = 1, 2$, то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Фур'є L_2 :

$$F_2[L_2[g(z)]] = -\beta^2 \tilde{g}(\beta) - k_1^2 \int_{-\infty}^{l_1} g_1(z) \overline{V_1(z, \beta)} \sigma_1 dz - k_2^2 \int_{l_1}^{l_2} g_2(z) \overline{V_2(z, \beta)} \sigma_2 dz - k_3^2 \int_{l_2}^\infty g_3(z) \overline{V_3(z, \beta)} \sigma_3 dz. \quad (3.222)$$

Доведення: При виконанні співвідношень (3.213) з інтерфейсними умовами одержуємо базову тотожність

$$g'_k(l_k) \overline{V_k(l_k, \beta)} - g_k(l_k) \overline{V'_k(l_k, \beta)} = \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} (g'_{k+1} \overline{V_{k+1}} - g_{k+1}(x) \overline{V'_{k+1}}) \Big|_{z=l_k}. \quad (3.223)$$

Проінтегрувавши в лівій частині рівності (3.223) два рази частинами під знаком інтегралів маємо:

$$F_2[L_2[g(z)]] = a_1^2 \sigma_1 (g_1' \bar{V}_1 - g_1 \bar{V}_1') \Big|_{-\infty}^{l_1} + a_2^2 \sigma_2 (g_2' \bar{V}_2 - g_2 \bar{V}_2') \Big|_{l_1}^{l_2} + (g_3' \bar{V}_3 - g_3 \bar{V}_3') \Big|_{l_2}^{\infty} +$$

$$\int_{-\infty}^{l_1} g_1(z) \left(a_1^2 \frac{d^2}{dz^2} \overline{V_1(z, \beta)} \right) \sigma_1 dz + \int_{l_1}^{l_2} g_2(z) \left(a_2^2 \frac{d^2}{dz^2} \overline{V_2(z, \beta)} \right) \sigma_2 dz + \int_{l_2}^{\infty} g_3(x) \left(a_3^2 \frac{d^2}{dx^2} \overline{V_3(z, \beta)} \right) \sigma_3 dz. \quad (3.224)$$

Внаслідок умов (3.220) отримуємо

$$\lim_{z \rightarrow -\infty} \left(\frac{dg_1}{dz} \overline{V_1(z, \beta)} - g_1(z) \frac{d}{dz} \overline{V_1(z, \beta)} \right) = 0; \lim_{z \rightarrow +\infty} \left(\frac{dg_3}{dz} \overline{V_3(z, \beta)} - g_3(z) \frac{d}{dz} \overline{V_3(z, \beta)} \right) = 0.$$

Внаслідок базової тотожності (3.223) та вибору $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$, поза інтегральні члени в точках $z=l_1$ та $z=l_2$ перетворюються в нуль. Якщо скористатись тим, що

$$D_j \frac{d^2 \bar{V}_j}{dz^2} \equiv -(\beta^2 + k_j^2) \overline{V_j(z, \beta)}, \text{ і розбити суми на два доданки, то отримаємо}$$

тотожність.

Висновок 1: Якщо на масообмінних межах $z=l_k$ ($k=1,2$) справджуються

$$\text{умови ідеального інтерфейсу} \quad A_{11,k} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, A_{12,k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{21,k} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ v_k & 0 \end{bmatrix},$$

$$A_{22,k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad k=1,2. \text{ то в цьому випадку маємо:}$$

$$z_{11} = -v_2 \sin \bar{b}_2 l, z_{12} = \bar{b}_2 \cos \bar{b}_2 l, z_{21} = \bar{b}_2 \cos \bar{b}_2 l, z_{22} = -v_1 \bar{b}_2^2 \sin \bar{b}_2 l,$$

$$l = l_2 = l_1, \omega_1 = -\bar{b}_2 (\bar{b}_1 + v_1 v_2 \bar{b}_3) \cos \bar{b}_2 l, \omega_2 = (v_1 \bar{b}_2^2 + v_2 \bar{b}_1 \bar{b}_3) \sin \bar{b}_2 l;$$

$$c_{11,k} = 1, c_{21,k} = v_k > 0, \sigma_1 = (v_1 v_2 a_1^2)^{-1}, \sigma_2 = (v_1 a_2^2)^{-1}, \sigma_3 = a_3^{-2};$$

$$f_{11,1} = v_1 v_2 \bar{b}_2^2 \bar{b}_3 + \bar{b}_1 (v_2^2 \bar{b}_3^2 \sin^2 \bar{b}_2 l + \cos^2 \bar{b}_2 l); \alpha_1 = v_1 v_2 \bar{b}_3;$$

$$f_{11,2} = v_1 \bar{b}_2^2 [v_2 \bar{b}_1 \bar{b}_3 + v_1 (v_2^2 \bar{b}_3^2 \cos^2 \bar{b}_2 l + \sin^2 \bar{b}_2 l)]; \alpha_2 = v_1 v_2 \bar{b}_3;$$

$$f_{11,3} = v_1 \bar{b}_2 (v_2^2 \bar{b}_3^2 - \bar{b}_2^2) \sin \bar{b}_2 l \cos \bar{b}_2 l; e(\beta) = v_1 v_2 \bar{b}_2^2;$$

$$\alpha_3 = v_1 v_2 \bar{b}_2 \bar{b}_3; y_{11} = -\cos \bar{b}_2 l_1, y_{12} = -\sin \bar{b}_2 l_1;$$

$$f_{12,1} = v_2 \bar{b}_3 (v_1 \bar{b}_2^2 + v_2 \bar{b}_1 \bar{b}_3) \sin \bar{b}_2 l_2 \sin \bar{b}_2 l + \bar{b}_2^2 (\bar{b}_1 + v_1 v_2 \bar{b}_3) \cos \bar{b}_2 l \cos \bar{b}_2 l_2; \quad (3.225)$$

$$f_{12,4} = v_2 \bar{b}_3 (v_1 \bar{b}_2^2 + v_2 \bar{b}_1 \bar{b}_3) \cos \bar{b}_2 l_2 \sin \bar{b}_2 l - \bar{b}_2^2 (\bar{b}_1 + v_1 v_2 \bar{b}_3) \sin \bar{b}_2 l_2 \cos \bar{b}_2 l.$$

Висновок 2: Якщо масообмінних межах $x=l_k$ ($k=1,2$) справджуються умови

$$\text{неідеального масообмінного інтерфейсу} \quad A_{11,k} = \begin{bmatrix} R_k & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{12,k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$A_{21,k} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ v_k & 0 \end{bmatrix}, \quad A_{22,k} = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \text{ то в цьому випадку маємо:}$$

$$\begin{aligned}
z_{11} &= v_2[(v_1 R_1 \bar{b}_2^2 - 1) \sin \bar{b}_2 - \bar{b}_2(v_1 R_1 + R_2) \cos \bar{b}_2 l]; c_{11,k} = 1, c_{21,k} = v_k > 0, \\
z_{12} &= \bar{b}_2 \cos \bar{b}_2 l - v_1 R_1 \bar{b}_2^2 \sin \bar{b}_2 l; \sigma_1 = (v_1 v_2 a_1^2)^{-1}, \sigma_2 = (v_2 a_2^2)^{-1}, \sigma_3 = a_3^{-2}; \\
z_{21} &= v_1 v_2 \bar{b}_2 (R_2 \bar{b}_2 \sin \bar{b}_2 l - \cos \bar{b}_2 l), \quad z_{22} = -v_1 \bar{b}_2^2 \sin \bar{b}_2 l; \quad l = l_2 - l_1, \\
\alpha_1 &= \alpha_2 = v_1 v_2 \bar{b}_3; \alpha_3 = \alpha_1 \bar{b}_2; \\
y_{11} &= -R_1 v_1 \bar{b}_2 \sin \bar{b}_2 l_1 - \cos \bar{b}_2 l_1, y_{12} = -R_1 v_1 \bar{b}_2 \cos \bar{b}_2 l_1 - \sin \bar{b}_2 l_1; \\
\omega_1 &= v_1 \bar{b}_2^2 (R_1 \bar{b}_1 + v_2 R_2 \bar{b}_3) \sin \bar{b}_2 l - \bar{b}_2 (b_1 + v_1 v_2 \bar{b}_3) \cos \bar{b}_2 l; \\
\omega_2 &= v_2 \bar{b}_2 \bar{b}_3 [(v_1 R_1 \bar{b}_2^2 - 1) \sin \bar{b}_2 l - \bar{b}_2 (v_1 R_1 + R_2) \cos \bar{b}_2 l - v_1 \bar{b}_2^2 \sin \bar{b}_2 l]; \\
f_{11,1} &= \bar{b}_1 (\bar{b}_3^2 z_{11}^2 + z_{12}^2) + v_1 v_2 \bar{b}_3 \bar{b}_2^2; b_j = a_j^{-1} (\beta^2 + k_j^2)^{1/2}, k_j^2 \geq 0; \\
f_{11,2} &= \bar{b}_3^2 z_{21} 2f + z_{22}^2 + v_1 v_2 \bar{b}_1 \bar{b}_3 \bar{b}_2^2; f_{11,3} = z_{12} z_{22} + \bar{b}_3^2 z_{11} z_{21}; \\
f_{12,1} &= -v_2 \bar{b}_3 (R_2 \bar{b}_2 \cos \bar{b}_2 l_2 + \sin \bar{b}_2 l_2) \omega_2(\beta) - \omega_1(\beta) \bar{b}_2 \cos \bar{b}_2 l_2; \\
f_{12,4} &= v_2 \bar{b}_3 (R_2 \bar{b}_2 \sin \bar{b}_2 l_2 + \cos \bar{b}_2 l_2) \omega_2(\beta) - \omega_1(\beta) \bar{b}_2 \sin \bar{b}_2 l_2.
\end{aligned} \tag{3.226}$$

Функції $V_j(x, \beta)$ визначаються згідно формул (3.190).

Висновок 3: Замінімо інтерфейсні умови (3.221) на умови

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) g_k(z) - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dz} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) g_{k+1}(z) \right] \Big|_{z=l_k} = \psi_{jk}; j, k = 1, 2. \tag{3.227}$$

У цьому випадку базова тотожність (3.223) і основна тотожність (3.222) набуває вигляду:

$$\begin{aligned}
\left(\overline{V_k(z, \beta)} \frac{dg_k}{dz} - g_k(z) \frac{d\overline{V_k}}{dz} \right) \Big|_{z=l_k} &= \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} \left(\overline{V_{k+1}(z, \beta)} \frac{dg_{k+1}}{dz} - g_{k+1}(z) \frac{d\overline{V_{k+1}}}{dz} \right) \Big|_{z=l_k} + \\
&\frac{1}{c_{11,k}} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d\overline{V_{k+1}}}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^k \overline{V_{k+1}} \right) \Big|_{z=l_k} \psi_{2k} - \left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d\overline{V_{k+1}}}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^k \overline{V_{k+1}} \right) \Big|_{z=l_k} \psi_{1k} \right];
\end{aligned} \tag{3.228}$$

$$\begin{aligned}
F_2[l_2[g(z)]] &= -\beta^2 \tilde{g}(\beta) - k_1^2 \int_{-\infty}^{l_1} g_1(z) \overline{V_1(z, \beta)} \sigma_1 dz - \\
&- k_2^2 \int_{l_1}^{l_2} g_2(z) \overline{V_1(z, \beta)} \sigma_2 dz - k_3^2 \int_{l_3}^{\infty} g_3(z) \overline{V_3(z, \beta)} \sigma_3 dz + \\
&+ \sum_{k=1}^2 \frac{a_k^2 \sigma_k}{c_{11,k}} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d\overline{V_{k+1}}}{dz} + \tilde{\beta}_{12}^k \overline{V_{k+1}} \right) \Big|_{z=l_k} \psi_{2k} - \left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d\overline{V_{k+1}}}{dz} + \tilde{\beta}_{22}^k \overline{V_{k+1}} \right) \Big|_{z=l_k} \psi_{1k} \right]
\end{aligned} \tag{3.229}$$

Зауваження: Методика побудови інтегральних операторів F_2 та F_2^{-1} без залучання нових ідей може бути застосована для побудови операторів F_n та F_n^{-1} для довільного $n \geq 3$.

Наявність основної тотожності (3.222) дозволяє застосувати побудоване інтегральне перетворення Фур'є із спектральним параметром для побудови

точних аналітичних розв'язків математичних моделей масопереносу для необмежених кусково-однорідних середовищ з врахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів переносу на поверхнях масообміну, логічна схема застосування яких подана в [20].

3.5. Скінченні інтегральні перетворення типу Ганкеля 1-го роду для однорідних циліндричних середовищ переносу

Розглядається методологія побудови скінченного інтегрального перетворення типу Ганкеля 1-го роду для однорідного обмеженого циліндричного середовища $I_0 = \{r : r \in (0, R), R < \infty\}$, породженого диференціальним оператором оператором

$$\text{Бесселя} \quad B_{\nu\alpha} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}(2\alpha + 1) \frac{d}{dr} - (\nu^2 - \alpha^2)r^{-2}, \nu \geq \alpha \geq \frac{1}{2} \quad \text{і} \quad \text{крайовим}$$

$$\text{диференціальним оператором} \quad \mathcal{L}_{11}^m = \left(\alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 \frac{\partial^m}{\partial t^m} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 \frac{\partial^m}{\partial t^m}, m = \overline{1, 2}, \quad |\alpha_{11}^1| + |\beta_{11}^1| \neq 0,$$

що врахує швидкості зміни градієнтів основних параметрів переносу на крайовій поверхні $r = R$. Побудова означених інтегральних перетворень для часткового випадку $\delta_{11}^1 = \gamma_{11}^1 \equiv 0$ розглянуто в праці [18]. Наявність похідної по t в крайовому операторі $\mathcal{L}_{11}^m, m = \overline{1, 2}$ приводить до появи спектрального параметра в крайовій умові відповідної сингулярної спектральної задачі Штурма-Ліувілля.

Означене скінченне інтегральне перетворення Ганкеля 1-го роду будуватимемо з використанням ядра Коші – фундаментальний розв'язок задачі Коші для B -параболічного рівняння масопереносу при однорідній крайовій умові. Отже, розглянемо задачу побудови обмеженого в області $D^+ = \{(t, r) : t \in (0, \infty), r \in (0, R)\}$ розв'язку рівняння масопереносу B -параболічного типу [23] для однорідного циліндричного середовища із нестационарним режимом масообміну на крайовій поверхні

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - D \cdot B_{\nu, \alpha} [u] = 0, \gamma^2 \geq 0, D > 0 \quad (3.231)$$

за початковою умовою

$$u(t, r)|_{t=0} = g(r) \quad (3.232)$$

та крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} (r^{\alpha-\nu} u) = 0, L_{11}^1 [u]|_{r=R} = 0. \quad (3.233)$$

Припустимо, що функція $u(t, r)$ є оригіналом за Лапласом щодо t [15]. У зображенні за Лапласом отримуємо крайову задачу: побудувати обмежений на I_0 розв'язок рівняння Бесселя для модифікованих функцій

$$(B_{v,\alpha}-q^2)u^*(p, r) = -\bar{g}(r), \quad q^2 = a^{-2}(p + \gamma^2), \quad \bar{g} = a^{-2} g(r) \quad (3.234)$$

за крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{d}{dr} [r^{v-\alpha} u^*(p, r)] = 0; \quad \left(\bar{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{11}^1 \right) u^*|_{r=R} = \delta_{11}^1 g'(R) + \gamma_{11}^1 g(R). \quad (3.235)$$

$$\text{Тут} \quad \bar{\alpha}_{11}^1 = \alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 p, \quad \bar{\beta}_{11}^1 = \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 p.$$

Зафіксуємо вітку $q = D^{-1/2}(p + \gamma^2)^{1/2}$, на якій $\Re eq > 0$. Фундаментальну систему розв'язків для рівняння $(B_{v,\alpha}-q^2)v = 0$ утворюють функції Бесселя $I_{v,\alpha}(qr)$ та $K_{v,\alpha}(qr)$ [7]. Безпосередньо перевіряється, що єдиним розв'язком крайової задачі (3.234), (3.235) є функція

$$u^*(p, r) = \int_0^R \mathcal{H}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) \bar{g}(\rho) \rho^{2\alpha+1} d\rho. \quad (3.236)$$

Тут бере участь функція Коші

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) = \frac{q^{2\alpha}}{U_{v,\alpha;11}^{11}(qR)} \begin{cases} I_{v,\alpha}(qr) \Psi_{v,\alpha;11}^{1*}(qR, q\rho), & 0 < r < \rho < R \\ I_{v,\alpha}(q\rho) \Psi_{v,\alpha;11}^{1*}(qR, qr), & 0 < \rho < r < R \end{cases}. \quad (3.237)$$

Вважається, що $\delta_{11}^1 g'(R) + \gamma_{11}^1 g(R) = 0$, $\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1 \neq 0$. Повертаючись в рівності (3.236) до оригіналу, одержуємо єдиний розв'язок задачі (3.231)- (3.233):

$$u(t, r) = \int_0^R \mathcal{H}_{v,\alpha}(t, r, \rho) g(\rho) \rho^{2\alpha+1} \sigma d\rho, \quad \sigma = a^{-2}. \quad (3.238)$$

За означенням Лаплас-оригінал $H_{v,\alpha}^*(p, r, \rho)$ знаходиться за формулою обернення [22, 33] $\mathcal{H}_{v,\alpha}(t, r, \rho) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty} \mathcal{H}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) e^{pt} dp$.

Особливими точками функції коші $H_{v,\alpha}^*(p, r, \rho)$ є точки галуження $p = -\gamma^2$ та $p = \infty$. Покладемо $\sqrt{p + \gamma^2} = i\beta$, тобто $p = -(\beta^2 + \gamma^2)$ та розглянемо трансцендентне рівняння

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^1 \frac{v-\alpha}{R} + \tilde{\beta}_{11}^1 \right) J_{v,\alpha}(bR) - \tilde{\alpha}_{11}^1 b^2 R J_{v+1,\alpha+1}(bR) = 0, \quad (3.239)$$

яке при $\delta_{11}^1 = 0$, $\gamma_{11}^1 = 0$ співпадає з відомим в математичній літературі [1]. Тут $\tilde{\alpha}_{11}^1 = \alpha_{11}^1 - (\beta^2 + \gamma^2) \delta_{11}^1$, $\tilde{\beta}_{11}^1 = \beta_{11}^1 - (\beta^2 + \gamma^2) \gamma_{11}^1$.

З використанням методикою праці [18] можна показати, що корені β_n трансцендентного рівняння (3.239) утворюють дискретний спектр: $\{\beta_n\}_{n=1}^\infty$. Таким

чином, точки $p_n = -(\beta_n^2 + \gamma^2)$ для функції $H_{v,\alpha}^*(p, r, \rho)$ є простими полюсами. За узагальненою теоремою розвинення (Ващенко-Захарченка та Хевісайда) [15] маємо:

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}(t, r, \rho) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-(\beta_n^2 + \gamma^2)t} \frac{J_{v,\alpha}(b_n r) J_{v,\alpha}(b_n \rho)}{\|J_{v,\alpha}(b_n r)\|_1^2}, b_n = a^{-1} \beta_n. \quad (3.240)$$

У формулі (2.10) квадрат норми власної функції

$$\begin{aligned} \|J_{v,\alpha}(b_n r)\|_1^2 &= \|J_{v,\alpha}(b_n r)\|^2 + G_{0,n} \equiv \int_0^R [J_{v,\alpha}(b_n r)]^2 \sigma r^{2\alpha+1} dr + G_{0,n} = \\ &= 2^{-1} \sigma R^{2\alpha+2} \left[J_{v,\alpha}^2(b_n R) - 2v J_{v,\alpha}(b_n R) J_{v+1,\alpha+1}(b_n R) + b_n^2 R^2 J_{v+1,\alpha+1}^2(b_n R) \right] + G_{0,n}; \\ G_{0,n} &= \sigma R^{2\alpha+1} (\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1)^{-1} \left[\delta_{11}^1 d/dr + \gamma_{11}^1 \right] J_{v,\alpha}(b_n r) \Big|_{r=R}^2 \equiv \\ &\equiv \sigma R^{2\alpha+1} (\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1)^{-1} \left[\delta_{11}^1 \frac{v-\alpha}{R} + \gamma_{11}^1 \right] J_{v,\alpha}(b_n R) - \delta_{11}^1 R b_n^2 J_{v+1,\alpha+1}(b_n R) \Big]^2. \end{aligned} \quad (3.241)$$

Звідси внаслідок початкової умови (3.232) отримуємо інтегральне зображення:

$$g(r) = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\int_0^R g(\rho) J_{v,\alpha}(b_n \rho) \rho^{2\alpha+1} \sigma d\rho \right) \frac{J_{v,\alpha}(b_n r)}{\|J_{v,\alpha}(b_n r)\|_1^2}. \quad (3.242)$$

Інтегральне зображення (3.242) визначає пряме $\mathcal{H}_{v,\alpha}$ й обернене $\mathcal{H}_{v,\alpha}^{-1}$ скінченне інтегральне перетворення Ганкеля 1-го роду із спектральним параметром (в крайовій умові):

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}[g(r)] = \int_0^R g(r) J_{v,\alpha}(b_n r) r^{2\alpha+1} \sigma dr \equiv g_n, \quad (3.243)$$

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}^{-1}[g_n] = \sum_{n=1}^{\infty} g_n \frac{J_{v,\alpha}(b_n r)}{\|J_{v,\alpha}(b_n r)\|_1^2} \equiv g(r). \quad (3.244)$$

Мають місце твердження.

Теорема 3.5.1 (про спектральну функцію): Система власних функцій $\{V_{v,\alpha}(r, \beta_n) \equiv J_{v,\alpha}(b_n r)\}_{n=1}^{\infty}$ узагальнено ортогональна, повна й замкнута на $(0, R)$.

Доведення: Теорема доводиться на основі міркувань, викладених в п.1.2 [13].

Теорема 3.5.2 (типу теореми Стеклова): Якщо функція $f(r) = B_{v,\alpha}[g(r)]$ неперервно диференційована на $(0, R)$, а функція $g(r)$ задовольняє крайові умови

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{d}{dr} [r^{\alpha-v} g(r)] = 0, \left[(\alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 B_{v,\alpha}) \frac{d}{dr} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 B_{v,\alpha} \right] g(r) \Big|_{r=R} = 0, \quad (3.245)$$

то функція $g(r)$ розкладається за системою власних функцій $\{V_{v,\alpha}(r, \beta_n)\}_{n=1}^{\infty}$ в абсолютно й рівномірно збіжний на множині $(0, R)$ ряд Фур'є (3.242).

Доведення: здійснюється на використанні методики доведення згідно підходів поданих у працях [12, 13].

Теорема 3.5.3 (про основну тотожність): Якщо функція $g(r) \in C^{(3)}(0, R)$ і задовольняє крайові умови

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[r^{2\alpha+1} \left(\frac{dg}{dr} V_{v,\alpha}(r, \beta_n) - g(r) \frac{d}{dr} V_{v,\alpha}(r, \beta_n) \right) \right] = 0; \quad \left(\tilde{\alpha}_{11,n}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11,n}^1 \right) g(r) \Big|_{r=R} = g_R \quad (3.246)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Бесселя $a^2 B_{v,\alpha}$:

$$\mathcal{H}_{v,\alpha} \left[a^2 B_{v,\alpha} [g(r)] \right] = -\beta_n^2 g_n + \left(\tilde{\alpha}_{11,n}^1 \right)^{-1} R^{2\alpha+1} V_{v,\alpha}(R, \beta_n) g_R, \quad (3.247)$$

$$\tilde{\alpha}_{11,n}^1 = \alpha_{11}^1 - (\beta_n^2 + \gamma^2) \delta_{11}^1, \quad \tilde{\beta}_{11,n}^1 = \beta_{11}^1 - (\beta_n^2 + \gamma^2) \gamma_{11}^1.$$

Доведення: головна тотожність (3.247) встановлюється методом дворазового інтегрування частинами під знаком інтегралу, з використанням властивостей функцій $V_{v,\alpha}(r, \beta_n)$ та $y(z)$ і умов (3.246).

Зауваження: Внаслідок трансцендентного рівняння (3.239) маємо тотожність

$$(\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1) J_{v,\alpha}(\beta_n R) = \tilde{\alpha}_{11,n}^1 \left[(\delta_{11}^1 \frac{v-\alpha}{R} + \gamma_{11}^1) V_{v,\alpha}(R, \beta_n) - R \delta_{11}^1 b_n^2 V_{v+1,\alpha+1}(R, \beta_n) \right].$$

При цьому рівність (3.247) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{v,\alpha} \left[a^2 B_{v,\alpha} [g(r)] \right] = \\ -\beta_n^2 g_n + \frac{R^{2\alpha+1} g_R}{\alpha_{11}^1 \gamma_{11}^1 - \beta_{11}^1 \delta_{11}^1} \left[(\delta_{11}^1 \frac{v-\alpha}{R} + \gamma_{11}^1) V_{v,\alpha}(R, \beta_n) - R \delta_{11}^1 b_n^2 V_{v+1,\alpha+1}(R, \beta_n) \right]. \end{aligned}$$

Наявність тотожності (3.247) дає можливість застосовувати запроваджене скінченне інтегральне перетворення Ганкеля 1-го роду із спектральним параметром для знаходження точних аналітичних розв'язків розглядуваних нестационарних математичних моделей переносу. Логічна схема побудови розв'язків таких квазістатичних і динамічних моделей подана в [20].

3.6. Скінченні гібридні інтегральні перетворення типу Ганкеля 2-го роду для обмежених неоднорідних n -складових циліндричних середовищ з симетричною напівпроникною порожниною

Запровадимо скінченне гібридне інтегральне перетворення типу Ганкеля 2-го роду для обмежених n -складових (n -інтерфейсних) неоднорідних циліндричних середовищ з порожниною, визначених областю

$$I_n = \left\{ r : r \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (R_{k-1}, R_k) R_0 > 0, R_{n+1} \equiv R < \infty \right\} \text{ і породженого гібридним диференціальним}$$

$$\text{оператором Бесселя } B_{(v,\alpha)} = \sum_{k=1}^{n+1} D_k \Theta(r - R_{k-1}) \Theta(R_k - r) B_{v_k, \alpha_k}; v_k \geq \alpha_k \geq -\frac{1}{2} \quad \text{в}$$

припущенні, що спектральний параметр β входить в крайові умови при $r = R_0$ і $r = R_{n+1}$ та систему інтерфейсних умов в $r = R_k, k = \overline{1, n}$ середовища з врахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів на масообмінних поверхнях.

Розглянемо в області I_n сингулярну спектральну задачу Штурма-Ліувілля: побудувати нетривіальний розв'язок системи диференціальних рівнянь Бесселя [23]

$$\left[D_m B_{v_m, \alpha_m} + (\beta^2 + \gamma_m^2) \right] V_{(v,\alpha);m}(r, \beta) = 0; m = \overline{1, n+1} \quad (3.354)$$

за крайовими умовами

$$\left[\tilde{\alpha}_{11}^0(\beta) \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^0(\beta) \right] V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) \Big|_{r=R_0} = 0; \left[\tilde{\alpha}_{j1}^k(\beta) \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^{n+1}(\beta) \right] V_{(v,\alpha);n+1}(r, \beta) \Big|_{r=R_{n+1}} = 0 \quad (3.255)$$

та системою n -інтерфейсних умов

$$\left(\left[\tilde{\alpha}_{j1}^k(\beta) \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^k(\beta) \right] V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) - \left[\tilde{\alpha}_{j2}^k(\beta) \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^k(\beta) \right] V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta) \right) \Big|_{r=R_k} = 0; k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2} \quad (3.256)$$

Будуючи розв'язок крайової задачі (3.254) – (3.256) як лінійну комбінацію фундаментальної системи розв'язків

$$V_{(v,\alpha);m}(r, \beta) = A_m J_{v_m, \alpha_m}(rb_m) + B_m N_{v_m, \alpha_m}(rb_m); b_m = a_m^{-1} (\beta^2 + \gamma_m^2)^{1/2}, m = \overline{1, n+1} \quad (3.257)$$

то крайові умови (3.255) і система інтерфейсних умов (3.256) для визначення сталих A_m, B_m дають алгебраїчну систему з $2n + 2$ рівнянь:

$$\begin{aligned} u_{v_1, \alpha_1; 11}^{01}(R_0 b_1) A_1 + u_{v_1, \alpha_1; 11}^{02}(R_0 b_1) B_1 &= 0, \\ u_{v_m, \alpha_m; j1}^{k1}(R_k b_m) A_m + u_{v_m, \alpha_m; j1}^{k2}(R_k b_m) B_m - \\ u_{v_{m+1}, \alpha_{m+1}; j2}^{k1}(R_k b_{m+1}) A_{m+1} - u_{v_{m+1}, \alpha_{m+1}; j2}^{k2}(R_k b_{m+1}) B_{m+1} &= 0; k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2}; \\ u_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}; 22}^{n+1,1}(R_{n+1} b_{n+1}) A_{n+1} + u_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}; 22}^{n+1,2}(R_{n+1} b_{n+1}) B_{n+1} &= 0. \end{aligned} \quad (3.258)$$

Для того, щоб алгебраїчна система (3.258) мала ненульовий розв'язок, необхідно і досить, щоб її визначник був рівний нулю:

$$\delta_{(\nu,\alpha)}(\beta) \equiv u_{\nu_{n+1},\alpha_{n+1};22}^{n+1,2}(b_{n+1}R_{n+1})\omega_{(\nu,\alpha)_{n+1};1}^{(n)}(\beta) - u_{\nu_{n+1},\alpha_{n+1};22}^{n+1,1}(b_{n+1}R_{n+1})\omega_{(\nu,\alpha)_{n+1};2}^{(n)}(\beta) = 0. \quad (3.259)$$

$$\text{Тут } \omega_{(\nu,\alpha)_1;1}^{(0)}(\beta) = u_{\nu_1\alpha_1;11}^{01}(b_1R_0), \quad \omega_{(\nu,\alpha)_1;2}^{(0)}(\beta) = u_{\nu_1\alpha_1;11}^{02}(b_1R_0),$$

$$\omega_{(\nu,\alpha)_{k+1};i}^{(k)}(\beta) = \omega_{(\nu,\alpha)_k;2}^{(k-1)}(\beta)\Psi_{\nu_k,\alpha_k;\nu_{k+1},\alpha_{k+1};1i}^k(b_kR_k, b_{k+1}R_k) - \\ - \omega_{(\nu,\alpha)_k;1}^{(k-1)}(\beta)\Psi_{\nu_k,\alpha_k;\nu_{k+1},\alpha_{k+1};2i}^k(b_kR_k, b_{k+1}R_k); i = \overline{1,2}; k = \overline{1,n}$$

$$\Psi_{\nu_k,\alpha_k;\nu_{k+1},\alpha_{k+1};im}^k(b_kR_k, b_{k+1}R_k) = u_{\nu_k,\alpha_k;11}^{ki}(b_kR_k)u_{\nu_{k+1},\alpha_{k+1};22}^{km}(b_{k+1}R_k) - u_{\nu_k,\alpha_k;21}^{ki}(b_kR_k)u_{\nu_{k+1},\alpha_{k+1};12}^{km}(b_{k+1}R_k); \\ (k) = 123\dots k; (\nu,\alpha)_k = \{\nu_1,\alpha_1,\nu_2,\alpha_2;\dots;\nu_k,\alpha_k\}.$$

Теорема 3.6.1 (про дискретний спектр): Корені β_j трансцендентного рівняння (3.89) дійсні, різні, симетрично розташовані відносно точки $\beta = 0$ й складають за модулем монотонно зростаючу послідовність з єдиною граничною точкою $\beta = \infty$.

Доведення: Доведення теореми проводиться за логічною схемою доведення Т.2.2.1 [13, 20].

Позначимо через $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_j, \dots$ додатні корені трансцендентного рівняння (3.259) в порядку їх зростання. Вважаємо виконаними співвідношення:

$$c_{11,k}c_{21,k} > 0, \quad c_{j2,k} = 0, c_{ji,j2}^{12,k} = c_{j1,j2}^{21,k}, \quad d_{11}^0 \geq 0; \quad d_{22}^{n+1} = \alpha_{22}^{n+1}\gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1}\delta_{22}^{n+1} \geq 0; \\ a_{11}^k > 0, a_{22}^k > 0, \quad \alpha_{22}^k\delta_{12}^k - \alpha_{12}^k\delta_{22}^k \geq 0, \quad \beta_{22}^k\gamma_{12}^k - \beta_{12}^k\gamma_{22}^k \geq 0, k = \overline{1,n}. \quad (3.260)$$

В припущенні виконанні рівностей

$$c_{j2,k} = 0, c_{j1,j2}^{12,k} = c_{j1,j2}^{21,k}; j = 1, 2, k = \overline{1,n}, \quad (3.261)$$

знаходимо коефіцієнти

$$\tilde{c}_{jk}(\beta) = \tilde{\alpha}_{2j}^k(\beta)\tilde{\beta}_{1j}^k(\beta) - \tilde{\alpha}_{1j}^k(\beta)\tilde{\beta}_{2j}^k(\beta) = c_{j1,k} - (\beta^2 + \gamma^2)(c_{j1,j2}^{12,k} - c_{j1,j2}^{21,k}) + c_{j2,k}(\beta^2 + \gamma^2)^2 \equiv c_{j1,k}; j = 1, 2; k = \overline{1,n}.$$

Це дозволяє визначити вагову функцію

$$\sigma(r) = \sum_{i=1}^{n+1} \Theta(r - R_{i-1})\Theta(R_i - r)\sigma_i r^{2\alpha_i+1}, \quad (3.262)$$

$$\sigma_i = \frac{1}{a_i^2} \frac{c_{11,i}c_{11,i+1}\dots c_{11,n}}{c_{21,i}c_{21,i+1}\dots c_{21,n}} \frac{R_i^{2\alpha_{i+1}+1}R_{i+1}^{2\alpha_{i+2}+1}\dots R_n^{2\alpha_{n+1}+1}}{R_i^{2\alpha_i+1}R_{i+1}^{2\alpha_{i+1}+1}\dots R_n^{2\alpha_n+1}}; i = \overline{1,n}; \sigma_{n+1} = \frac{1}{a_{n+1}^2}.$$

Дискретному спектру $\{\beta_j\}_{j=1}^{\infty}$ відповідає дискретна вектор-функція

$$\{V_{(\nu,\alpha)}\}_{j=1}^{\infty} = \{V_{(\nu,\alpha);1}(r, \beta_j), V_{(\nu,\alpha);2}(r, \beta_j); \dots; V_{(\nu,\alpha);n}(r, \beta_j), V_{(\nu,\alpha);n+1}(r, \beta_j)\}_{j=1}^{\infty},$$

Компоненти $V_{(v,\alpha);m}(r, \beta_j)$ якої побудуємо таким чином. Підставимо в алгебраїчну систему (3.88) $\beta = \beta_j$ й відкинемо останнє рівняння внаслідок лінійної залежності. Виберемо

$$A_1 = A_0 u_{v_1, \alpha_1; 11}^{02}(R_0 b_{1j}) \equiv A_0 \omega_{(v, \alpha)_1; 2}^{(0)}(\beta_j), b_{mj} = a_m^{-1}(\beta_j^2 + \gamma_m^2)^{1/2};$$

$$B_1 = -A_0 u_{v_1, \alpha_1; 11}^{01}(R_0 b_{1j}) \equiv -A_0 \omega_{(v, \alpha)_1; 1}^{(0)}(\beta_j); a_m > 0, \gamma_m^2 \geq 0,$$

де A_0 – підлягає визначенню. Решта рівнянь утворюють неоднорідну алгебраїчну систему $2n$ рівнянь відносно $2n$ невідомих з визначником

$$\Delta_{(v, \alpha)}^{(n)}(\beta_j) \equiv \prod_{k=1}^n \Delta_{\alpha_{k+1}}^k(\beta_j^2) = \prod_{k=1}^n \frac{2}{\pi} \frac{c_{21,k}}{b_{k+1,j}^{2\alpha_{k+1}} R_k^{2\alpha_{k+1}+1}} \neq 0. \quad (3.263)$$

Оскільки одержана система фактично розпалася на n пар рівнянь по два рівняння в кожній парі, то безпосередньо отримуємо рекурентні співвідношення:

$$A_{k+1} = \frac{A_0}{\prod_{i=1}^k \Delta_{\alpha_{i+1}}^i(b_j)} \omega_{(v, \alpha)_{k+1}; 2}^{(k)}(\beta_j), B_{k+1} = -\frac{A_0}{\prod_{i=1}^k \Delta_{\alpha_{i+1}}^i(b_j)} \omega_{(v, \alpha)_{k+1}; 1}^{(k)}(\beta_j), k = \overline{1, n}. \quad (3.264)$$

Із рівностей (3.264) випливає, $A_0 = \Delta_{(v, \alpha)}^{(n)}(\beta_j) \neq 0$. Цим компоненти $V_{(v, \alpha); m}(r, \beta_j)$ спектральної вектор-функції $V_{(v, \alpha)}(r, \beta_j)$ визначені і мають структуру:

$$V_{(v, \alpha); 1}(r, \beta_j) = \Delta_{(v, \alpha)}^{(n)}(\beta_j) \left[\omega_{(v, \alpha)_1; 2}^{(0)}(\beta_j) J_{v_1, \alpha_1}(b_{1j} r) - \omega_{(v, \alpha)_1; 1}^{(0)}(\beta_j) N_{v_1, \alpha_1}(b_{1j} r) \right],$$

$$V_{(v, \alpha); k+1}(r, \beta_j) = \left(\prod_{i=k+1}^n \Delta_{\alpha_{i+1}}^i(\beta_j^2) \right) \left[\omega_{(v, \alpha)_{k+1}; 2}^{(k)}(\beta_j) J_{v_{k+1}, \alpha_{k+1}}(b_{k+1,j} r) - \right.$$

$$\left. - \omega_{(v, \alpha)_{k+1}; 1}^{(k)}(\beta_j) N_{v_{k+1}, \alpha_{k+1}}(b_{k+1,j} r) \right], k = \overline{1, n-1} \quad (3.265)$$

$$V_{(v, \alpha); n+1}(r, \beta_j) = \omega_{(v, \alpha)_{n+1}; 2}^{(n)}(\beta_j) J_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}}(b_{n+1,j} r) - \omega_{(v, \alpha)_{n+1}; 1}^{(n)}(\beta_j) N_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}}(b_{n+1,j} r).$$

При $\beta_j \neq \beta_s$ розглянемо функцію

$$G_n(\beta_j, \beta_s) = a_1^2 \sigma_1 R_0^{2\alpha_1+1} (d_{11}^0)^{-1} V_{(v, \alpha); 11}^{(0)}(R_0, \beta_j) V_{(v, \alpha); 11}^{(0)}(R_0, \beta_s) +$$

$$+ R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} (d_{22}^{n+1})^{-1} V_{(v, \alpha); 22}^{(n+1)}(R_{n+1}, \beta_j) V_{(v, \alpha); 22}^{(n+1)}(R_{n+1}, \beta_s) +$$

$$+ \sum_{k=1}^n a_k^2 \sigma_k R_k^{2\alpha_k+1} c_{11,k}^{-2} \left\{ \sqrt{a_{11}^k} Z_{(v, \alpha); 2k}(R_k, \beta_j) + \sqrt{a_{22}^k} Z_{(v, \alpha); 1k}(R_k, \beta_j) \right\} \times$$

$$\times \left[\sqrt{a_{11}^k} Z_{(v, \alpha); 2k}(R_k, \beta_s) + \sqrt{a_{22}^k} Z_{(v, \alpha); 1k}(R_k, \beta_s) \right] + c_{11,k} \left[\sqrt{c_{21,22}^{-11,k}} V'_{(v, \alpha); k+1}(R_k, \beta_j) + \right.$$

$$+ \left. \left[\sqrt{c_{21,22}^{-22,k}} V_{(v, \alpha); k+1}(R_k, \beta_j) \right] \left[\sqrt{c_{21,22}^{-11,k}} V'_{(v, \alpha); k+1}(R_k, \beta_s) + \sqrt{c_{21,22}^{-22,k}} V_{(v, \alpha); k+1}(R_k, \beta_s) \right] \right\};$$

$$c_{21,22}^{ii,k} = -c_{21,22}^{ii,k} \geq 0;$$

$$Z_{(v,\alpha);jk}(R_k, \beta) = \tilde{\alpha}_{j2}^k(\beta) V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta) + \tilde{\beta}_{j2}^k(\beta) V_{(v,\alpha);k+1}(R_k, \beta); j = 1, 2.$$

Введемо до розгляду скалярний добуток

$$(g(r), f(r))_1 = (g(r), f(r)) + G_n(\beta_j, \beta_s) \equiv \sum_{i=1}^{n+1} \int_{R_{i-1}}^{R_i} g_i(r) f_i(r) \sigma_i r^{2\alpha_i+1} dr + G_n(\beta_j, \beta_s). \quad (3.267)$$

Виявляється, що в сенсі скалярного добутку (3.267) диференціальний оператор $B_{(v,\alpha)}$ є узагальнено самоспряжений, а система його власних вектор-функцій $\{V_{(v,\alpha)}(r, \beta)\}_{j=1}^{\infty}$ узагальнено ортогональна. При цьому справджується наступне твердження.

Теорема 3.6.2 (про дискретну функцію). Система власних функцій $\{V_{(v,\alpha)}(r, \beta)\}_{j=1}^{\infty}$ гібридного диференціального оператора Бесселя $B_{(v,\alpha)}$, визначеного рівністю (3.84), узагальнено ортогональна, повна й замкнута на множині I_n .

Теорема 3.6.3 (типу теореми Стеклова): Кожна тричі неперервна диференційована на множині I_n вектор функція

$$g(r) = \sum_{i=1}^{n+1} \Theta(r - R_{i-1}) \Theta(R_i - r) g_i(r),$$

яка задовольняє крайові умови (3.85) та умови спряження (3.86), розкладається в абсолютно й рівномірно збіжний на компактi ряд Фур'є за системою

$$\{V_{(v,\alpha)}(r, \beta)\}_{j=1}^{\infty} \\ g(r) = \sum_{j=1}^{\infty} \int_{R_0}^{R_{n+1}} g(\rho) V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta_j) \sigma(\rho) d\rho \frac{V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta_j)\|_1^2} \quad (3.268)$$

В (3.98) бере участь квадрат норми власної вектор-функції

$$V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) = \sum_{i=1}^{n+1} \Theta(r - R_{i-1}) \Theta(R_i - r) V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j)$$

в узагальненому розумінні:

$$\|V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta_j)\|_1^2 = (V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta_j), V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta_j))_1 = \int_{R_0}^R [V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)]^2 \sigma(r) dr + \\ + G_n(\beta_j, \beta_j) \equiv \sum_{i=1}^{n+1} \int_{R_{i-1}}^{R_i} [V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j)]^2 \sigma_i r^{2\alpha_i+1} dr + G_n(\beta_j, \beta_j) \quad (3.269)$$

Доведення: Доведення теореми ґрунтується на логічній схемі доведення Т.2.2.3 [13, 20]

Ряд Фур'є (3.268) породжує пряме $H_{(v,\alpha);n}$ і обернене $H_{(v,\alpha);n}^{-1}$ скінчене гібридне інтегральне перетворення типу Ганкеля 2-го роду із спектральним параметром на сегменті $[R_0, R_{n+1}]$ з n –інтерфейсних взаємодій:

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);n}[g(r)] = \int_{R_0}^{R_{n+1}} g(r) V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) \sigma(r) dr = \sum_{i=1}^{n+1} \int_{R_{i-1}}^{R_i} g_i(r) V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) \sigma_i r^{2\alpha_i+1} dr \equiv g_j \quad (3.270)$$

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);n}^{-1}[g_j] = \sum_{j=1}^{\infty} g_j V_{(v,\alpha)} \frac{V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2} \equiv g(r). \quad (3.271)$$

Застосування запровадженого формулами (3.270), (3.271) скінченного гібридного інтегрального перетворення типу Ганкеля 2-го роду із спектральним параметром до побудування точних аналітичних розв'язків математичних моделей масопереносу, розглянутих в попередніх параграфах, стає можливим завдяки наявності тотожності інтегрального перетворення гібридного диференціального оператора Бесселя $B_{(v,\alpha)}$ (3.84).

Теорема 3.6.4 (про основну тотожність): Якщо вектор-функція

$$f(r) = \sum_{i=1}^{n+1} \Theta(r - R_{i-1}) \Theta(R_i - r) a_i^2 B_{v_i, \alpha_i}[g_i(r)]$$

неперервно диференційована на множині I_n , а вектор-функція $g(r)$ задовольняє крайові умови

$$\left(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^0 \right) g_1(r) \Big|_{r=R_0} = \omega_0 \left(\tilde{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^{n+1} \right) g_{n+1} \Big|_{r=R_{n+1}} = \omega_{n+1} \quad (3.272)$$

та систему інтерфейсних умов

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) g_k(r) - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) g_{k+1} \right] \Big|_{r=R_k} = \omega_{jk}, \quad j=1, 2; k=\overline{1, n}, \quad (3.273)$$

то має місце основна тотожність інтегрального перетворення гібридного диференціального оператора Бесселя $B_{(v,\alpha)}$, визначеного рівністю (3.254):

$$\begin{aligned} H_{(v,\alpha);n}[B_{(v,\alpha)}[g(r)]] = & -\beta_j^2 g_j - \sum_{m=1}^{n+1} k_m^2 \int_{R_{m-1}}^{R_m} g_m(r) V_{(v,\alpha);m}(r, \beta_j) \sigma_m r^{2\alpha_m+1} dr + \\ & + a_1^2 \sigma_1 R_0^{(2\alpha_1+1)} (d_{11}^0)^{-1} V_{(v,\alpha);11}^{(0)}(R_0, \beta_j) \omega_0 + R_{n+1}^{(2\alpha_{n+1}+1)} (d_{22}^{n+1})^{-1} V_{(v,\alpha);22}^{(n+1)}(R_{n+1}, \beta_j) \omega_{n+1} + \\ & + \sum_{k=1}^n c_{11}^{-k} a_k^2 \sigma_k R_k^{2\alpha_k+1} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} \omega_{2k} - \left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} \omega_{1k} \right] \end{aligned} \quad (3.274)$$

Доведення: Доведення проводиться за логічною схемою доведення теореми 3.2.4.

Зауважимо, що запровадженні скінченні інтегральні перетворення є поліпараметричні, тобто дозволяють одержати точні аналітичні розв'язки для достатньо широкого класу математичних моделей переносу з урахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів переносу на границях та інтерфейсних масообмінних поверхнях (гідродинаміки, фільтрації, дифузії), що описані системами рівнянь в частинних похідних для багатоскладових неоднорідних і нанопористих середовищ різної конфігурації [24-27].

3.7 Гібридні інтегральні перетворення типу Фур'є-Бесселя для обмежених двоскладових циліндричних середовищ переносу

Інтегральне перетворення, породжене на множині $I_I^+ = \{r : r \in (0, R_I) \cup (R_I, \infty)\}$ гібридним диференціальним оператором Бесселя

$$M_{(v, \alpha); I} = a_1^2 \Theta(r) \Theta(R_I - r) B_{v_1, \alpha_1} + a_2^2 \Theta(r - R_I) B_{v_2, \alpha_2} \quad (3.275)$$

В припущенні, що в точці $r = R_I$ мають місце умови спряження

$$\left[\left[\alpha_{j1}^1 \frac{d}{dr} + \beta_{j1}^1 \right] g_1(r) - \left[\alpha_{j2}^1 \frac{d}{dr} + \beta_{j2}^1 \right] g_2(r) \right] \Big|_{r=R_I} = 0, \quad j = 1, 2, \quad (3.276)$$

побудовано в праці [17].

Тут $\alpha_j^2 > 0$, $\Theta(r)$ - одинична функція Хевісайда,

$$(v, \alpha) = \{v_1, \alpha_1; v_2, \alpha_2\}, \quad v_j \geq \alpha_j \geq -\frac{1}{2}; \quad \alpha_{jk}^1 \geq 0, \quad \beta_{jk}^1 \geq 0,$$

$$c_{11}c_{21} > 0, \quad c_{j1} = \alpha_2^1 \beta_{1j}^1 - \alpha_{1j}^1 \beta_{2j}^1, \quad B_{v, \alpha} = \frac{d^2}{dr^2} + r^{-(2\alpha+1)} \frac{d}{dr} - (v^2 - \alpha^2) r^{-2}.$$

Методика, запропонована в праці [17], дає можливість здійснити узагальнення результату праці [17] на випадок, коли спектральний параметр $\beta \in (0, \infty)$ присутній в умовах спряження, що враховує нестационарний режим масообміну на поверхні $r = R_I$.

$$\left[\left[\tilde{\alpha}_{j1}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^1 \right] g_1(r) - \left[\tilde{\alpha}_{j2}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^1 \right] g_2(r) \right] \Big|_{r=R_I} = 0; \quad j = 1, 2 \quad (3.277)$$

Тут і в подальшому прийнято позначення:

$$\tilde{a}_{jk}^m = a_{jk}^m - \delta_{jk}^m (\beta^2 + \gamma^2), \quad \tilde{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_{jk}^m (\beta^2 + \gamma^2), \quad \gamma^2 \geq 0.$$

Розглянемо задачу побудови обмеженого в області

$$D_I^+ = \{(t, r) : t \in (0, \infty), \quad r \in I_I^+ = (0, R_I) \cup (R_I, \infty)\}$$

розв'язку системи диференціальних рівнянь тепло переносу другого порядку параболічного типу [23]

$$\begin{aligned}\frac{\partial u_1}{\partial t} + \gamma_1^2 u_1 - a_1^2 B_{v_1, \alpha_1} [u_1] &= 0, \quad r \in (0, R_1) \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \gamma_2^2 u_2 - a_2^2 B_{v_2, \alpha_2} [u_2] &= 0, \quad r \in (R_1, \infty)\end{aligned}\quad (3.278)$$

За початковими умовами

$$u_1(t, r)|_{t=0} = g_1(r), \quad r \in (0, R_1); \quad u_2(t, r)|_{t=0} = g_2(r), \quad r \in (R_1, \infty) \quad (3.279)$$

та інтерфейсними умовами

$$\left(L_{j1}^l [u_1(t, r)] - L_{j2}^l [u_2(t, r)] \right) \Big|_{r=R_1} = 0, \quad j = 1, 2 \quad (3.280)$$

У рівності (3.280) беруть участь диференціальні оператори:

$$L_{jk}^m = \left(\alpha_{jk}^m + \delta_{jk}^m \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{jk}^m + \gamma_{jk}^m \frac{\partial}{\partial t}; \quad j, k = 1, 2; \quad m = 1, 2, \dots$$

Припустимо, що вектор-функція $u(t, r) = \{u_1(t, r); u_2(t, r)\}$ є оригіналом за Лапласом щодо t [15]. У зображенні за Лапласом

$$u_j^*(p, r) = \int_0^\infty u_j(t, r) e^{-pt} dt, \quad j = 1, 2 \quad (3.281)$$

Задачі (3.278)-(3.280) відповідає задача побудови обмеженого на множині I_1^+ розв'язку сепаратної системи диференціальних рівнянь Бесселя другого порядку для модифікованих функцій [16]

$$\begin{aligned}(B_{v_1, \alpha_1} - q_1^2) u_1^*(p, r) &= -\bar{g}_1(r), \quad r \in (0, R_1) \\ (B_{v_2, \alpha_2} - q_2^2) u_2^*(p, r) &= -\bar{g}_2(r), \quad r \in (R_1, \infty)\end{aligned}\quad (3.282)$$

за умовами спряження

$$\left[\left(\bar{\alpha}_{j1}^l \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{j1}^l \right) u_1^*(p, r) - \left(\bar{\alpha}_{j2}^l \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{j2}^l \right) u_2^*(p, r) \right] \Big|_{r=R_1} = 0, \quad j = 1, 2 \quad (3.283)$$

У рівностях (3.282), (3.283) прийняті позначення:

$$\begin{aligned}\bar{g}_j(r) &= a_j^{-2} g_j(r), \quad g_j = a_j^{-1} \left(p + \gamma_j^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \\ \bar{\alpha}_{jk}^l &= \alpha_{jk}^l + \delta_{jk}^l p, \quad \bar{\beta}_{jk}^l = \beta_{jk}^l + \gamma_{jk}^l p; \quad j, k = 1, 2.\end{aligned}$$

Ми вважаємо, що числа

$$\Psi_{j1} = \left[\delta_{j1}^l g_1'(R_1) + \gamma_{j1}^l g_1(R_1) \right] - \left[\delta_{j2}^l g_2'(R_1) + \gamma_{j2}^l g_2(R_1) \right] = 0, \quad j = 1, 2.$$

У протилежному випадку ми переходимо до нових початкових даних.

Зафіксуємо ту гілку двозначної функції g_j , на якій $Re q_j > 0$, $j = 1, 2$.

Фундаментальну систему розв'язків для рівняння Бесселя $(B_{v,\alpha} - q^2)v = 0$ утворюють функції $I_{v,\alpha}(gr)$ та $K_{v,\alpha}(gr)$ [16].

Внаслідок властивостей функцій, що утворюють фундаментальну систему розв'язків, обмежений на I_l^+ розв'язок крайової задачі (3.282), (3.283) будуватимемо за правилами [29]:

$$\begin{aligned} u_1^* &= A_l I_{v_l, \alpha_l}(q_l r) + \int_0^{R_l} \mathcal{E}_{v_l, \alpha_l; 1}(p, r, \rho) \bar{g}_1(\rho) \rho^{2\alpha_l+1} d\rho \\ u_2^* &= B_2 K_{v_2, \alpha_2}(q_2 r) + \int_{R_l}^{\infty} \mathcal{E}_{v_2, \alpha_2; 2}(p, r, \rho) \bar{g}_2(\rho) \rho^{2\alpha_2+1} d\rho \end{aligned} \quad (3.284)$$

Тут $\mathcal{E}_{v,\alpha}(p, r, \rho)$ - функції Коші:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \mathcal{E}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} &= 0 \\ \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} &= -\rho^{-(2\alpha+1)} \end{aligned} \quad (3.285)$$

Визначаємо функції:

$$\begin{aligned} U_{v,\alpha; jk}^{m1}(qR_m) &\equiv \left(\bar{\alpha}_{jk}^m \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{jk}^m \right) I_{v,\alpha}(gr) \Big|_{r=R_m} = \\ &= \left(\bar{\alpha}_{jk}^m \frac{v-\alpha}{R_m} + \bar{\beta}_{jk}^m \right) I_{v,\alpha}(qR_m) + \bar{\alpha}_{jk}^m R_m q^2 I_{v+1, \alpha+1}(qR_m); \\ U_{v,\alpha; jk}^{m2}(qR_m) &\equiv \left(\bar{\alpha}_{jk}^m \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{jk}^m \right) K_{v,\alpha}(gr) \Big|_{r=R_m} = \\ &= \left(\bar{\alpha}_{jk}^m \frac{v-\alpha}{R_m} + \bar{\beta}_{jk}^m \right) K_{v,\alpha}(qR_m) + \bar{\alpha}_{jk}^m R_m q^2 K_{v+1, \alpha+1}(qR_m); \end{aligned}$$

Безпосередньо перевіряємо, що за функції Коші $\mathcal{E}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho)$ можна взяти функції:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{v_l, \alpha_l; 1}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_l^{2\alpha_l}}{U_{v_l, \alpha_l; 11}^{11}(q_l R_l)} \begin{cases} I_{v_l, \alpha_l}(q_l r) \Psi_{v_l, \alpha_l; 11}^{I*}(q_l R_l, q_l \rho) \\ I_{v_l, \alpha_l}(q_l \rho) \Psi_{v_l, \alpha_l; 11}^{I*}(q_l R_l, q_l r) \end{cases} \\ &\quad \begin{matrix} 0 < r < \rho < R_l, \\ 0 < \rho < r < R_l, \end{matrix} \end{aligned} \quad (3.286)$$

$$\mathcal{E}_{v_2, \alpha_2; 2}^*(p, r, \rho) = \frac{q_2^{2\alpha_2}}{U_{v_2, \alpha_2; 12}^{12}(q_2 R_l)} \begin{cases} K_{v_2, \alpha_2}(q_2 r) \Psi_{v_2, \alpha_2; 12}^{I*}(q_2 R_l, q_2 \rho) \\ K_{v_2, \alpha_2}(q_2 \rho) \Psi_{v_2, \alpha_2; 12}^{I*}(q_2 R_l, q_2 r) \end{cases}$$

$$\begin{aligned} R_l < r < \rho < \infty; \\ R_l < \rho < r < \infty; \end{aligned} \quad (3.287)$$

Умови спряження (3.283) для визначення сталих A_l , B_l дають алгебраїчну систему з двох рівнянь:

$$\begin{aligned} A_l U_{v_l, \alpha_l; 1l}^{1l}(q_l R_l) - B_l U_{v_2, \alpha_2; 12}^{12}(q_2 R_2) &= 0 \\ A_l U_{v_l, \alpha_l; 2l}^{1l}(q_l R_l) - B_l U_{v_2, \alpha_2; 22}^{12}(q_2 R_l) &= G_{l2}^*. \end{aligned} \quad (3.288)$$

У системі (3.118) бере участь функція

$$\begin{aligned} G_{l2}^* &= \frac{c_{1l}^*(p)}{R_l^{2\alpha_l+1}} \int_0^{R_l} \frac{I_{v_l, \alpha_l}(q_l \rho)}{U_{v_l, \alpha_l; 1l}^{1l}(q_l R_l)} \bar{g}_2(\rho) \rho^{2\alpha_l+1} d\rho + \\ &+ \frac{c_{2l}^*(\rho)}{R_l^{2\alpha_2+1}} \int_{R_l}^{\infty} \frac{K_{v_2, \alpha_2}(q_2 \rho)}{U_{v_2, \alpha_2; 12}^{12}(q_2 R_l)} \bar{g}_2(\rho) \rho^{2\alpha_2+1} d\rho; \\ c_{jl}^*(p) &= \bar{\alpha}_{2j} \bar{\beta}_{1j} - \bar{\alpha}_{1j} \bar{\beta}_{2j}, \quad j = 1, 2 \end{aligned}$$

Припустимо, що виконана умова однозначної розв'язності даної крайової задачі: для $p = \sigma + i\pi$ із $Re p = \sigma \geq \sigma_0$, де σ_0 - абсциса збіжності інтеграла Лапласа, та $Im p = \tau \in (-\infty, +\infty)$ визначник алгебраїчної системи (3.288)

$$\Delta_{(v, \alpha); 12}^*(p) \equiv -U_{v_l, \alpha_l; 2l}^{1l}(q_l R_l) U_{v_2, \alpha_2; 12}^{12}(q_2 R_l) + U_{v_l, \alpha_l; 1l}^{1l}(q_l R_l) U_{v_2, \alpha_2; 22}^{12}(q_2 R_l) \neq 0 \quad (3.289)$$

Визначимо функції впливу:

$$\mathcal{H}_{(v, \alpha); 1l}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{(v, \alpha); 12}^*(p)} \begin{cases} I_{v_1, \alpha_1}(q_1 r) \left[\Delta_{(v, \alpha); 12}^*(p) K_{v_1; \alpha_1}(q_1 \rho) - \Delta_{(v, \alpha); 22}^*(p) I_{v_1, \alpha_1}(q_1 \rho) \right], \\ I_{v_1, \alpha_1}(q_1 r) \left[\Delta_{(v, \alpha); 12}^*(p) K_{v_1; \alpha_1}(q_1 \rho) - \Delta_{(v, \alpha); 22}^*(p) I_{v_1, \alpha_1}(q_1 \rho) \right], \end{cases}$$

$$\begin{aligned} 0 < r < \rho < R_1; \\ 0 < \rho < r < R_1; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{(v, \alpha); 12}^*(p, r, \rho) &= -\frac{c_{21}^*(p)}{R_1^{2\alpha_1+1}} \frac{1}{\Delta_{(v, \alpha); 12}^*(p)} I_{v_1, \alpha_1}(q_1 r) K_{v_2, \alpha_2}(q_2 \rho); \\ \mathcal{H}_{(v, \alpha); 21}^*(p, r, \rho) &= -\frac{c_{11}^*(p)}{R_1^{2\alpha_1+1}} \frac{1}{\Delta_{(v, \alpha); 12}^*(p)} I_{v_1, \alpha_1}(q_1 r) K_{v_2, \alpha_2}(q_2 \rho); \end{aligned} \quad (3.290)$$

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);22}^*(p,r,\rho) = -\frac{q_2^{2\alpha_2}}{\Delta_{(v,\alpha);12}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} &K_{v_2,\alpha_2}(q_2\rho) \left[\Delta_{(v,\alpha);12}^*(p) I_{v_2,\alpha_2}(q_2r) - \Delta_{(v,\alpha);11}^*(p) K_{v_2,\alpha_2}(q_2r) \right], \\ &K_{v_2,\alpha_2}(q_2\rho) \left[\Delta_{(v,\alpha);12}^*(p) I_{v_2,\alpha_2}(q_2r) - \Delta_{(v,\alpha);11}^*(p) K_{v_2,\alpha_2}(q_2r) \right], \end{aligned} \right.$$

$$\begin{aligned} 0 < r < \rho < R_1, \\ 0 < \rho < r < R_1, \end{aligned}$$

$$\Delta_{(v,\alpha);jk}^*(p) = U_{v_1,\alpha_1;11}^{1j}(q_1R_1)U_{v_2,\alpha_2;22}^{1k}(q_2R_1) - U_{v_1,\alpha_1;21}^{1j}(q_1R_1)U_{v_2,\alpha_2;12}^{1k}(q_2R_1).$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (3.288), підстановки одержаних значень сталих A_1, B_1 у формули (3.284) отримуємо єдиний розв'язок крайової задачі (3.282), (3.283):

$$u_j^*(p,r) = \int_0^{R_1} \mathcal{H}_{(v,\alpha);j1}^*(p,r,\rho) \bar{g}_1(\rho) \rho^{2\alpha_1+1} d\rho + \int_{R_1}^{\infty} \mathcal{H}_{(v,\alpha);j2}^*(p,r,\rho) \bar{g}_2(\rho) \rho^{2\alpha_2+1} d\rho, \quad j=1,2.$$

(3.291)

Особливими точками функції впливу $\mathcal{H}_{(v,\alpha);jk}^*(p,r,\rho)$ є точки галуження $p = -\gamma_1^2$, $p = -\gamma_2^2$ і $p = \infty$. Внаслідок леми Йордана й теореми Коші [15] для обчислення оригіналу функції впливу одержуємо правило:

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);jk}^*(p,r,\rho) = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Im} \left\{ \mathcal{H}_{(v,\alpha);jk}^* \left(e^{\pi i} (\beta^2 + \gamma^2), r, \rho \right) \right\} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} \beta d\beta; \quad j,k=1,2$$

(3.292)

$$\text{Тут} \quad \gamma^2 = \max \{ \gamma_1^2; \gamma_2^2 \}, \quad p = -(\beta^2 + \gamma^2) \equiv (\beta^2 + \gamma^2) \exp(\pi i),$$

$$q_j = ib_j \equiv i(\beta^2 + k_j^2)^{\frac{1}{2}} a_j^{-1},$$

$$k_j^2 = \gamma^2 - \gamma_j^2 \geq 0, \quad j=1,2; \quad \beta \in (0, \infty).$$

Визначимо функції:

$$\begin{aligned} u_{v,\alpha;jk}^{m1}(b_s R_m) &= \left(\tilde{\alpha}_{jk}^m \frac{v-\alpha}{R_m} + \tilde{\beta}_{jk}^m \right) J_{v,\alpha}(b_s R_m) - \tilde{\alpha}_{jk}^m R_m b_s^2 J_{v+1,\alpha+1}(b_s R_m), \\ u_{v,\alpha;jk}^{m2}(b_s R_m) &= \left(\tilde{\alpha}_{jk}^m \frac{v-\alpha}{R_m} + \tilde{\beta}_{jk}^m \right) N_{v,\alpha}(b_s R_m) - \tilde{\alpha}_{jk}^m R_m b_s^2 J_{v+1,\alpha+1}(b_s R_m); \\ \tilde{\alpha}_{jk}^m &= \alpha_{jk}^m - \delta_{jk}^m (\beta^2 + \gamma^2), \quad \tilde{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_{jk}^m (\beta^2 + \gamma^2); \\ \Psi_{v,\alpha;jk}^m(b_s R_m, b_s r) &= u_{v,\alpha;jk}^{m1}(b_s R_m) N_{v,\alpha}(b_s r) - u_{v,\alpha;jk}^{m2}(b_s R_m) J_{v,\alpha}(b_s r). \end{aligned}$$

(3.293)

Внаслідок формул обходу для модифікованих функцій Бесселя [17, 18]

$$I_{\nu,\alpha}(ix) = \exp\left[(\nu - \alpha)\frac{\pi i}{2}\right] J_{\nu,\alpha}(x);$$

$$K_{\nu,\alpha}(ix) = -\frac{\pi i}{2} \exp\left[-(\nu + \alpha)\frac{\pi i}{2}\right] \left[J_{\nu,\alpha}(x) - iN_{\nu,\alpha}(x)\right] \quad (3.294)$$

маємо:

$$U_{\nu,\alpha;jk}^{m1}(ib_s R_m) = e^{(\nu-\alpha)\frac{\pi i}{2}} u_{\nu,\alpha;jk}^{m1}(b_s R_m);$$

$$U_{\nu,\alpha;jk}^{m2}(ib_s R_m) = -\frac{\pi i}{2} e^{-(\nu+\alpha)\frac{\pi i}{2}} \left[u_{\nu,\alpha;jk}^{m1}(b_s R_m) - iu_{\nu,\alpha;jk}^{m2}(b_s R_m)\right];$$

$$\Psi_{\nu,\alpha;jk}^{m*}(ib_s R_m, ib_s r) = -\frac{\pi}{2} e^{-\pi i \alpha} \Psi_{\nu,\alpha;jk}^m(b_s R_m, b_s r). \quad (3.295)$$

$$\Delta_{(\nu,\alpha)_2;12}^* \left(e^{\pi i} (\beta^2 + \gamma^2) \right) = -\frac{\pi i}{2} e^{-\pi i \alpha} \left[\omega_{(\nu,\alpha)_2;1}(\beta) - i\omega_{(\nu,\alpha)_2;2}(\beta) \right] e^{\nu_1 - \nu_2 \frac{\pi i}{2}}, \quad \alpha = \frac{1}{2}(\alpha_1 + \alpha_2);$$

$$\omega_{(\nu,\alpha)_2;j}^{(1)}(\beta) = u_{\nu_1,\alpha_1;11}^{11}(b_1 R_1) u_{\nu_2,\alpha_2;22}^{1j}(b_2 R_1) - u_{\nu_1,\alpha_1;21}^{11}(b_1 R_1) u_{\nu_2,\alpha_2;12}^{1j}(b_2 R_1) \equiv$$

$$\equiv \Psi_{(\nu,\alpha)_2;1j}^{(1)}(b_1 R_1, b_2 R_1), \quad (\nu, \alpha)_2 = \{\nu_1, \alpha_1; \nu_2, \alpha_2\}, \quad j = 1, 2.$$

Розглянемо числові матриці 2-го порядку:

$$A_{j1,k} = \begin{bmatrix} \alpha_{1j}^k & \beta_{1j}^k \\ \alpha_{2j}^k & \beta_{2j}^k \end{bmatrix}, \quad A_{j2,k} = \begin{bmatrix} \delta_{1j}^k & \gamma_{1j}^k \\ \delta_{2j}^k & \gamma_{2j}^k \end{bmatrix}, \quad j = 1, 2; \quad k = \overline{1, n}.$$

Визначимо числа:

$$c_{j1,k} \equiv -\det A_{j1,k} = \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k; \quad c_{j2,k} \equiv -\det A_{j2,k} = \delta_{2j}^k \gamma_{1j}^k - \delta_{1j}^k \gamma_{2j}^k; \quad (3.296)$$

$$c_{11,12}^{12,k} = \alpha_{11}^k \gamma_{21}^k - \alpha_{21}^k \gamma_{11}^k; \quad c_{11,12}^{21,k} = \beta_{11}^k \delta_{21}^k - \beta_{21}^k \delta_{11}^k;$$

$$c_{21,22}^{12,k} = \alpha_{12}^k \gamma_{22}^k - \alpha_{22}^k \gamma_{12}^k; \quad c_{21,22}^{21,k} = \beta_{12}^k \delta_{22}^k - \beta_{22}^k \delta_{12}^k;$$

Припустимо, що справджується співвідношення:

$$c_{11,k} \cdot c_{21,k} > 0, \quad c_{j2,k} = 0, \quad c_{11,12}^{12,k} = c_{11,12}^{21,k}, \quad c_{21,22}^{12,k} = c_{21,22}^{21,k}, \quad (3.297)$$

Визначимо функції:

$$V_{(\nu,\alpha)_2;1}(r, \beta) = \frac{2}{\pi} \frac{c_{21,1}}{b_2^{2\alpha_2} R_1^{2\alpha_2+1}} J_{\nu_1, \alpha_1}(b_1 r); \quad \sigma_1 = \frac{c_{11,1}}{c_{21,1}} \frac{R_1^{2\alpha_2+1}}{R_1^{2\alpha_1+1}} \frac{1}{\alpha_1^2}, \quad \sigma_2 = \frac{1}{a_2^2};$$

$$V_{(\nu,\alpha)_2;2}(r, \beta) = \omega_{(\nu,\alpha)_2;2}^{(1)}(\beta) J_{\nu_2, \alpha_2}(b_2 r) - \omega_{(\nu,\alpha)_2;1}^{(1)}(\beta) N_{\nu_2, \alpha_2}(b_2 r); \quad (3.298)$$

$$\Omega_{(\nu,\alpha)}(\beta) = \beta b_2^{2\alpha_2} \left(\left[\omega_{(\nu,\alpha)_2;1}^{(1)}(\beta) \right]^2 + \left[\omega_{(\nu,\alpha)_2;2}^{(1)}(\beta) \right]^2 \right)^{-1}.$$

У результаті виконання у формулі (3.292) зазначених операцій отримуємо оригінали функцій впливу:

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);jk}(t,r,\rho) = \int_0^\infty e^{-(\beta^2+\gamma^2)t} \cdot V_{(v,\alpha);j}(r,\beta) \cdot V_{(v,\alpha);k}(\rho,\beta) \cdot \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta a_k^2 \sigma_k; \quad (3.299)$$

$$j,k=1,2.$$

Перейшовши у формулах (3.291) до оригіналу, одержуємо єдиний розв'язок задачі (3.278)-(3.280):

$$u_j(t,r) = \int_0^\infty e^{-(\beta^2+\gamma^2)t} \cdot V_{(v,\alpha);j}(r,\beta) \cdot \left[\int_0^{R_1} g_1(\rho) V_{(v,\alpha);1}(\rho,\beta) \rho^{2\alpha_1+1} \sigma_1 d\rho + \int_{R_1}^\infty g_2(\rho) V_{(v,\alpha);2}(\rho,\beta) \rho^{2\alpha_2+1} \sigma_2 d\rho \right] \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta, \quad j,k=1,2. \quad (3.300)$$

Внаслідок початкових умов (3.109) маємо інтегральні зображення:

$$g_1(r) = \int_0^\infty V_{(v,\alpha);1}(\rho,\beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \int_0^{R_1} g_1(\rho) V_{(v,\alpha);1}(\rho,\beta) \rho^{2\alpha_1+1} \sigma_1 d\rho, \quad r \in (0, R_1) \quad (3.301)$$

$$g_2(r) = \int_0^\infty V_{(v,\alpha);2}(\rho,\beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \int_{R_1}^\infty g_2(\rho) V_{(v,\alpha);2}(\rho,\beta) \rho^{2\alpha_2+1} \sigma_2 d\rho, \quad r \in (R_1, \infty) \quad (3.302)$$

Якщо з допомогою одиничної функції Хевісайда $\Theta(r)$ визначити спектральну функцію

$$V_{(v,\alpha)}(r,\beta) = V_{(v,\alpha);1}(r,\beta) \cdot \Theta(r) \cdot \Theta(R_1 - r) + V_{(v,\alpha);2}(r,\beta) \cdot \Theta(r - R_1),$$

вагову функцію

$$\sigma(r) = \sigma_1 \cdot \Theta(r) \cdot \Theta(R_1 - r) + \sigma_2 \Theta(r - R_1)$$

та функцію

$$g(r) = g_1(r) \cdot \Theta(r) \cdot \Theta(R_1 - r) + g_2(r) \cdot \Theta(r - R_1),$$

то рівності (3.131), (3.132) визначають інтегральне зображення:

$$g(r) = \int_0^\infty V_{(v,\alpha)}(r,\beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \int_0^\infty g(\rho) V_{(v,\alpha)}(\rho,\beta) \sigma(\rho) d\rho \quad (3.303)$$

Внаслідок властивостей ядра Коші як дельта-подібної послідовності приходимо до твердження.

Теорем 3.7.1: якщо функція

$$f(r) = g(r) \left[r^{\alpha_1 + \frac{1}{2}} \cdot \Theta(r) \cdot \Theta(R_1 - r) + r^{\alpha_2 + \frac{1}{2}} \cdot \Theta(r - R_1) \right]$$

неперервна, абсолютно сумовна й має обмежену варіацію на множині $(0, \infty)$ та виконується співвідношення, то для будь-якого $r \in I_1^+$ справджується інтегральне зображення (3.303).

Доведення: доведення теореми приводиться за голінною схемою доведення [13, 20].

Зауваження 3.7.1: У випадку, коли функція $f(r)$ кусково-неперервна, в лівій частині рівності (3.303) замість $g(r)$ треба писати

$$\frac{1}{2}(g(r-0) + g(r+0)).$$

Зауваження 3.7.2: При $\delta_{jk}^1 = 0$, $\gamma_{jk}^1 = 0$ одержуємо безпосередньо результат, отриманий в праці [5].

Інтегральне зображення (3.303) визначає пряме $H_{(v,\alpha);1}$ та обернене $H_{(v,\alpha);1}^{-1}$ гібридне інтегральне перетворення типу Фур'є-Бесселя із спектральним параметром на полярній осі з однією точкою спряження:

$$H_{(v,\alpha);1}[g(r)] = \int_0^\infty g(r) \cdot V_{(v,\alpha)}(r, \beta) \sigma(r) dr \equiv \tilde{g}(\beta) \quad (3.304)$$

$$H_{(v,\alpha);1}^{-1}[\tilde{g}(r)] = \int_0^\infty \tilde{g}(r) \cdot V_{(v,\alpha)}(r, \beta) \Omega(\beta) dr \equiv g(r) \quad (3.305)$$

В основі застосування запровадженого формулами (3.134), (3.135) гібридного інтегрального перетворення лежить основна тотожність інтегрального перетворення гібридного диференціального оператора Бесселя $M_{(v,\alpha);1}$

Теорема 3.4.2: Якщо функція

$$f(r) = \Theta(r) \cdot \Theta(R_1 - r) \cdot B_{v_1, \alpha_1}[g_1(r)] + \Theta(r - R_1) \cdot B_{v_2, \alpha_2}[g_2(r)]$$

неперервно диференційована на $(0, \infty)$, виконуються співвідношення (3.297), граничні рівності

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{2\alpha_1+1} \left(\frac{dg_1}{dr} V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) - g_1(r) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) \right) = 0, \quad (3.306)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{2\alpha_2+1} \left(\frac{dg_2}{dr} V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) - g_2(r) \frac{d}{dr} V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) \right) = 0, \quad (3.307)$$

$$\Psi_{j1} \equiv [\delta_j^1 g_1'(R_1) + \gamma_{j1}^1 g_1(R_1)] - [\delta_{j2}^1 g_2'(R_1) + \gamma_{j2}^1 g_2(R_1)] = 0, \quad j=1,2 \quad (3.308)$$

та умови спряження

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^1 \right) g_1(r) - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^1 \right) g_2(r) \right] \Big|_{r=R_1} = 0, \quad j=1,2 \quad (3.309)$$

то має місце основна тотожність інтегрального перетворення гібридного диференціального оператора $M_{(v,\alpha);1}$:

$$H_{(v,\alpha);1} \left[M_{(v,\alpha);1} [g(r)] \right] = -\beta^2 \tilde{g}(\beta) - k_1^2 \int_0^{R_1} g_1(r) V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) \times \\ \times r^{2\alpha_1+1} \sigma_1 dr - k_2^2 \int_{R_1}^{\infty} g_2(r) V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) r^{2\alpha_2+1} \sigma_2 dr. \quad (3.310)$$

Доведення: внаслідок умов спряження (3.309) та співвідношення (3.297) встановлюємо базову тотожність

$$g_1'(R_1) V_{(v,\alpha);1}(R_1, \beta) - g_1(R_1) V_{(v,\alpha);1}'(R_1, \beta) = \\ = \frac{c_{21,1}}{c_{11,1}} \left(g_2'(R_1) V_{(v,\alpha);2}(R_1, \beta) - g_2(R_1) V_{(v,\alpha);2}'(R_1, \beta) \right) \quad (3.311)$$

Якщо $\gamma^2 = \gamma_1^2$, то $k_1^2 = 0$, $k_2^2 = \gamma_1^2 - \gamma_2^2 > 0$. Якщо $\gamma^2 = \gamma_2^2$, то $k_1^2 = \gamma_2^2 - \gamma_1^2 > 0$, $k_2^2 = 0$. В обох випадках після інтегрування два рази частинами під знаком інтегралів в лівій частині рівності (3.310) маємо:

$$H_{(v,\alpha);1} \left[M_{(v,\alpha);1} [g(r)] \right] = a_1^2 \sigma_1 r^{2\alpha_1+1} \left(g_1'(r) V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) - g_1(r) V_{(v,\alpha);1}'(r, \beta) \right) \Big|_0^{R_1} + \\ + a_2^2 \sigma_2 r^{2\alpha_2+1} \left(g_2'(r) V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) - g_2(r) V_{(v,\alpha);2}'(r, \beta) \right) \Big|_{R_1}^{\infty} - \\ - \left(\beta^2 + k_1^2 \right) \int_0^{R_1} g_1(r) V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) \sigma_1 r^{2\alpha_1+1} dr - \left(\beta^2 + k_2^2 \right) \int_{R_1}^{\infty} g_2(r) V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) \sigma_2 r^{2\alpha_2+1} dr \quad (3.312)$$

Якщо скористатися граничними рівностями (3.306), (3.307), базовою тотожністю (3.311) й структурою σ_1 , σ_2 , то позаінтегральні члени в (3.312) зникають. Розбиваючи суми, що залишилися, на два доданки, отримуємо основну тотожність (3.310).

Зауваження: система інтерфейсних умов (3.309) неоднорідна:

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^1 \right) g_1(r) - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^1 \right) g_2(r) \right] \Big|_{r=R_1} = \Psi_{j1}, \quad j=1,2 \quad (3.313)$$

У цьому випадку базова тотожність має вигляд:

$$g_1'(R_1) V_{(v,\alpha);1}(R_1, \beta) - g_1(R_1) V_{(v,\alpha);1}'(R_1, \beta) = \frac{c_{21,1}}{c_{11,1}} \left(g_2'(R_1) V_{(v,\alpha);2}(R_1, \beta) - g_2(R_1) V_{(v,\alpha);2}'(R_1, \beta) \right) + \\ + \frac{1}{c_{11,1}} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^1 V_{(v,\alpha);2}'(R_1, \beta) + \tilde{\beta}_{12}^1 V_{(v,\alpha);2}(R_1, \beta) \right) \Psi_{21} - \left(\tilde{\alpha}_{22}^1 V_{(v,\alpha);2}'(R_1, \beta) + \tilde{\beta}_{22}^1 V_{(v,\alpha);2}(R_1, \beta) \right) \Psi_{11} \right] \quad (3.314)$$

Основна тотожність (3.310) при цьому набуває форми:

$$H_{(v,\alpha);1} \left[M_{(v,\alpha);1} [g(r)] \right] = -\beta^2 \tilde{g}(\beta) - k_1^2 \int_0^{R_1} g_1(r) V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) r^{2\alpha_1+1} \sigma_1 - \\ - k_2^2 \int_{R_1}^{\infty} g_2(r) V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) r^{2\alpha_2+1} \sigma_2 dr + c_{11,1}^{-1} \alpha_1^2 \sigma_1 R_1^{2\alpha_1+1} \times \\ \times \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^1 \right) V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) \Big|_{r=R_1} \cdot \Psi_{21} - \left(\tilde{\alpha}_{22}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^1 \right) V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) \Big|_{r=R_1} \cdot \Psi_{11} \right]$$

Якщо врахувати структуру σ_1 та структуру $V_{(v,\alpha);2}(r, \beta)$, то будемо мати:

$$c_{11,1}^{-1} \alpha_1^2 \sigma_1 R_1^{2\alpha_1+1} = c_{21,1}^{-1} R_1^{2\alpha_2+1}; \\ \left(\tilde{\alpha}_{12}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^1 \right) V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) \Big|_{r=R_1} = \frac{2}{\pi} \frac{c_{21,1}}{b_2^{2\alpha_2} R_1^{2\alpha_2+1}} u_{v_1, \alpha_1; 11}^{11}(b_1 R_1); \\ \left(\tilde{\alpha}_{22}^1 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^1 \right) V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) \Big|_{r=R_1} = \frac{2}{\pi} \frac{c_{21,1}}{b_2^{2\alpha_2} R_1^{2\alpha_2+1}} u_{v_1, \alpha_1; 21}^{11}(b_1 R_1);$$

Структура останнього доданку в рівності (3.145) набуває вигляду:

$$\frac{2}{\pi} b_2^{-2\alpha_2} \left[u_{v_1, \alpha_1; 11}^{11}(b_1 R_1) \Psi_{21} - u_{v_1, \alpha_1; 21}^{11}(b_1 R_1) \Psi_{11} \right]. \quad (3.316)$$

Логічну схему застосування запровадженого інтегрального перетворення проілюструємо на осесиметричних математичних моделях масопереносу для не обмежених циліндричних двоскладових середовищ.

Задача квазістатисти: Побудувати обмежений в області D_1^+ розв'язок сепаратної задачі системи рівнянь масопереносу параболічного типу [23] для необмеженого (по радіальній координаті r) двоскладового циліндричного середовища з нестационарним режимом масообміну по лінії розділу $r = R_1$

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + \gamma_1^2 u_1 - a_1^2 B_{v_1, \alpha_1} [u_1(t, r)] = f_1(t, r), \quad r \in (0, R_1) \\ \frac{\partial u_2}{\partial t} + \gamma_2^2 u_2 - a_2^2 B_{v_2, \alpha_2} [u_2(t, r)] = f_2(t, r), \quad r \in (R_1, \infty) \quad (3.317)$$

за початковими умовами

$$u_1|_{t=0} = g_1(r), \quad r \in (0, R_1); \quad u_2|_{t=0} = g_2(r), \quad r \in (R_1, \infty) \quad (3.318)$$

та умовами спряження

$$\left(L_{j1}^1 [u_1(t, r)] - L_{j2}^1 [u_2(t, r)] \right) \Big|_{r=R_1} = 0, \quad j = 1, 2. \quad (3.319)$$

Розв'язання: Припустимо, що $\max \{ \gamma_1^2; \gamma_2^2 \} = \gamma_1^2$ ($k_1^2 = 0$, $k_2^2 = \gamma_1^2 - \gamma^2 > 0$), і мають місце співвідношення (3.287).

Запишемо систему (3.317) і початкові умови (3.318) в матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_1^2 - a_1^2 B_{v_1, \alpha_1} \right) u_1 \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_2^2 - a_2^2 B_{v_2, \alpha_2} \right) u_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, r) \\ f_2(t, r) \end{bmatrix}; \quad \begin{bmatrix} u_1(t, r) \\ u_2(t, r) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_1(r) \\ g_2(r) \end{bmatrix}; \quad (3.320)$$

Інтегральний оператор $H_{(v, \alpha);1}$, що діє за правилом (3.304), зобразимо у вигляді операторної матриці-рядка:

$$H_{(v, \alpha);1}[\dots] = \begin{bmatrix} \int_0^{R_1} \dots V_{(v, \alpha);1}(r, \beta) \sigma_1 r^{2\alpha_1+1} dr \int_{R_1}^{\infty} \dots V_{(v, \alpha);2}(r, \beta) \sigma_2 r^{2\alpha_2+1} dr \end{bmatrix}. \quad (3.321)$$

Застосуємо операторну матрицю-рядок (3.321) за правилом множення матриць до задачі (3.320). Внаслідок основної тотожності (3.310) отримуємо задачу Коші:

$$\left(\frac{d}{dt} + \beta^2 + \gamma_1^2 \right) \tilde{u}(t, \beta) = \tilde{f}(t, \beta), \quad \tilde{u}(t, \beta) \Big|_{t=0} = \tilde{g}(\beta). \quad (3.322)$$

Тут прийняті позначення:

$$\tilde{u} = \tilde{u}_1 + \tilde{u}_2 = \int_0^{R_1} u_1(t, r) V_{(v, \alpha);1}(r, \beta) \sigma_1 r^{2\alpha_1+1} dr + \int_{R_1}^{\infty} u_2(t, r) V_{(v, \alpha);2}(r, \beta) \sigma_2 r^{2\alpha_2+1} dr;$$

$$\tilde{f} = \tilde{f}_1(t, \beta) + \tilde{f}_2(t, \beta); \quad \tilde{g}(\beta) = \tilde{g}_1(\beta) + \tilde{g}_2(\beta).$$

Безпосередньо перевіряємо, що розв'язком задачі Коші (3.292) є функція

$$\begin{aligned} \tilde{u}(t, \beta) &= e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} \cdot \tilde{g}(\beta) + \int_0^t e^{-(\beta^2 + \gamma^2)(t-\tau)} \tilde{f}(\tau, \beta) d\tau \equiv \\ &\equiv \int_0^t e^{-(\beta^2 + \gamma^2)(t-\tau)} \left[\tilde{f}(\tau, \beta) + \tilde{g}(\beta) \delta_+(\tau) \right] d\tau \end{aligned} \quad (3.323)$$

Обернений до $H_{(v, \alpha);1}$ інтегральний оператор $H_{(v, \alpha);1}^{-1}$ зобразимо у вигляді операторної матриці-стовпця:

$$H_{(v, \alpha);1}^{-1}[\dots] = \begin{bmatrix} \int_0^{\infty} \dots V_{(v, \alpha);1}(r, \beta) \Omega_{(v, \alpha)}(\beta) d\beta \\ \int_0^{\infty} \dots V_{(v, \alpha);2}(r, \beta) \Omega_{(v, \alpha)}(\beta) d\beta \end{bmatrix} \quad (3.324)$$

Застосуємо операторну матрицю-стовпець (3.324) за правилом множення матриць-елементів $[\tilde{u}(t, \beta)]$, де функція $\tilde{u}(t, \beta)$ визначена формулою (3.323). У результаті елементарних перетворень отримуємо єдиний розв'язок параболічної задачі масопереносу (3.317)-(3.319):

$$\begin{aligned}
& u_j(t, r) \int_0^t \int_0^{R_1} \mathcal{H}_{(v, \alpha); j1}(t - \tau, r, \rho) [f_1(\tau, \rho) + g_1(\rho) \delta_+(\tau)] \sigma_1 \rho^{2\alpha_1+1} d\rho d\tau + \\
& + \int_0^t \int_{R_1}^\infty \mathcal{H}_{(v, \alpha); j2}(t - \tau, r, \rho) [f_2(\tau, \rho) + g_2(\rho) \delta_+(\tau)] \sigma_2 \rho^{2\alpha_2+1} d\rho d\tau; \quad j = 1, 2.
\end{aligned} \tag{3.325}$$

У рівності (3.155) беруть участь функції впливу

$$\mathcal{H}_{(v, \alpha); jk}^*(t, r, \rho) = \int_0^t e^{-(\beta^2 + \gamma_1^2)t} \cdot V_{(v, \alpha); j}(\rho, \beta) \cdot V_{(v, \alpha); k}(\rho, \beta) \Omega_{(v, \alpha)}(\beta) d\beta; \quad j, k = 1, 2. \tag{3.326}$$

породжені неоднорідністю системи (початкових даних), та дельта-функції $\delta_+(\tau)$, зосереджена в точці $\tau = 0 +$. Вектор-функція $u(t, r) = \{u_1(t, r); u_2(t, r)\}$ повністю визначає єдиний розв'язок розглядуваної параболічної задачі масопереносу.

Зауваження: Умови спряження (3.149) неоднорідні

$$\left(L_{j1}^1 [u_1(t, r)] - L_{j2}^1 [u_2(t, r)] \right) \Big|_{r=R_1} = \omega_j(t) \tag{3.327}$$

$$\Psi_{j1} \neq 0, \quad j = 1, 2.$$

Визначимо функції Гріна умов спряження

$$\mathcal{R}_{(v, \alpha); 1j}(t, r) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma_1^2)t} \cdot b_2^{-2\alpha_2} u_{v_1, \alpha_1; 21}^{11}(b_1(\beta) R_1) V_{(v, \alpha); j}(r, \beta) \Omega_{(v, \alpha)} d\beta, \tag{3.328}$$

$$\mathcal{R}_{(v, \alpha); 2j}(t, r) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma_1^2)t} \cdot b_2^{-2\alpha_2} u_{v_1, \alpha_1; 11}^{11}(b_1(\beta) R_1) V_{(v, \alpha); j}(r, \beta) \Omega_{(v, \alpha)} d\beta,$$

та функції

$$\begin{aligned}
W_j(t, r) = & \int_0^t \left[\mathcal{R}_{(v, \alpha); j1}(t - \tau, r) \omega_1(\tau) + \mathcal{R}_{(v, \alpha); j2}(t - \tau, r) \omega_2(\tau) \right] d\tau + \\
& + \mathcal{R}_{(v, \alpha); j1}(t, r) \Psi_{11} + \mathcal{R}_{(v, \alpha); j2}(t, r) \Psi_{21}, \quad j = 1, 2.
\end{aligned} \tag{3.329}$$

Безпосередньо перевіряється, що єдиний розв'язок параболічної задачі масопереносу (3.317), (3.318), (3.327) описуються функції

$$u_j(t, r) = u_j(t, r) + W_j(t, r), \quad j = 1, 2. \tag{3.330}$$

Тут функції $u_j(t, r)$ визначаються формулою (3.155), а функції $W_j(t, r)$ - формулою (3.329).

Задачі динаміки: побудувати обмежений в області D_1^+ розв'язок сепаратної системи рівнянь масопереносу гіперболічного типу [8] для необмеженого по

радіальній координаті r двоскладового суцільного циліндричного середовища з нестационарним режимом масообміну на поверхні розділу $r = R_1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u_1}{\partial t^2} + \gamma_1^2 u_1 - a_1^2 B_{v_1, \alpha_1} [u_1] &= f_1(t, r), \quad r \in (0, R_1) \\ \frac{\partial^2 u_2}{\partial t^2} + \gamma_2^2 u_2 - a_2^2 B_{v_2, \alpha_2} [u_2] &= f_2(t, r), \quad r \in (R_1, \infty) \end{aligned} \quad (3.331)$$

за початковими умовами

$$\begin{aligned} u_1|_{t=0} &= g_{11}(r), \quad \left. \frac{\partial u_1}{\partial t} \right|_{t=0} = g_{12}(r) \\ u_2|_{t=0} &= g_{21}(r), \quad \left. \frac{\partial u_2}{\partial t} \right|_{t=0} = g_{22}(r) \end{aligned} \quad (3.332)$$

та умовами спряження

$$\left(\Theta_{j1}^1 [u_1(t, r)] - \Theta_{j2}^1 [u_2(t, r)] \right) \Big|_{r=R_1} = 0, \quad j = 1, 2. \quad (3.333)$$

Тут беруть участь диференціальні оператори

$$\Theta_{jm}^1 = \left(\alpha_{jm}^1 + \delta_{jm}^1 \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{jm}^1 + \gamma_{jm}^1 \frac{\partial^2}{\partial t^2}; \quad m = 1, 2.$$

Розв'язання: у припущеннях задачі квазістатистики систему (3.331) і початкові умови (3.332) зобразимо у матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma_1^2 - a_1^2 B_{v_1, \alpha_1} \right) u_1(t, r) \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma_2^2 - a_2^2 B_{v_2, \alpha_2} \right) u_2(t, r) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, r) \\ f_2(t, r) \end{bmatrix}; \quad (3.334)$$

$$\begin{bmatrix} u_1(t, r) \\ u_2(t, r) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_{11}(r) \\ g_{21}(r) \end{bmatrix}, \quad \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_1(t, r) \\ u_2(t, r) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} g_{12}(r) \\ g_{22}(r) \end{bmatrix}, \quad (3.335)$$

Застосуємо до задачі (3.334), (3.335) за правилом множення матриць операторну матрицю-рядок (3.321). Внаслідок тотожності (3.310) одержуємо задачі Коші:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \beta^2 + \gamma_1^2 \right) \tilde{u}(t, \beta) = \tilde{f}(t, \beta), \quad (3.336)$$

$$\tilde{u}(t, \beta) \Big|_{t=0} = \tilde{g}(\beta), \quad \frac{d}{dt} \tilde{u}(t, \beta) \Big|_{t=0} = \tilde{g}_2(\beta) \quad (3.337)$$

Безпосередньо перевіряється, що розв'язок задачі Коші (3.336), (3.337) є функція

$$\tilde{u}(t, \beta) = \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} \tilde{g}_2(\beta) + \frac{d}{dt} \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} \tilde{g}_1(\beta) + \int_0^t \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} (t - \tau)}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} \tilde{f}(\tau, \beta) d\tau \quad (3.338)$$

Визначимо функції

$$G_j(t, r) = f_j(t, r) + g_{j2}(r) \delta_+(t), \quad j = 1, 2 \quad (3.339)$$

та функції впливу

$$\mathcal{H}_{(v, \alpha); jk}(t, r, \rho) = \int_0^t \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} V_{(v, \alpha); j}(r, \beta) V_{(v, \alpha); k}(\rho, \beta) \Omega_{(v, \alpha)}(\beta) d\beta, \quad (3.340)$$

$$j, k = 1, 2.$$

У результаті застосування до матриці-елемента $[\tilde{u}(t, \beta)]$, де функція $\tilde{u}(t, \beta)$ визначається формулою (3.338), матриці-стовпця (3.324) за правилом множення матриць отримуємо функції

$$\begin{aligned} u_j(t, r) = & \int_0^t \int_0^{R_1} \mathcal{H}_{(v, \alpha); j1}(t - \tau, r, \rho) G_1(\tau, \rho) \sigma_1 \rho^{2\alpha_1 + 1} d\rho d\tau + \int_0^t \int_{R_1}^\infty \mathcal{H}_{(v, \alpha); j2}(t - \tau, r, \rho) G_2(\tau, \rho) \sigma_2 \rho^{2\alpha_2 + 1} d\rho d\tau + \\ & + \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_0^{R_1} \mathcal{H}_{(v, \alpha); j1}(t, r, \rho) g_{11}(\rho) \sigma_1 \rho^{2\alpha_1 + 1} d\rho + \int_0^{R_1} \mathcal{H}_{(v, \alpha); j2}(t, r, \rho) g_{21}(\rho) \sigma_2 \rho^{2\alpha_2 + 1} d\rho \right], \quad j = 1, 2. \end{aligned} \quad (3.341)$$

Які повністю визначають єдиний розв'язок гіперболічної задачі (3.331)-(3.333).

Ми припустили, що числа

$$\Psi_{j1,i} = \delta_{j1}^1 g_{1i}^1(R_1) + \gamma_{j1}^1 g_{1j}(R_1) - (\delta_{j2}^1 g_{2i}^1(R_1) + \gamma_{j2}^1 g_{2i}(R_1)) = 0; \quad i, j = 1, 2.$$

Нехай тепер умови спряження (3.163) неоднорідні, тобто

$$(\Theta_{j1}^1[u_1(t, r)] - \Theta_{j2}^1[u_2(t, r)]) \Big|_{r=R_1} = \omega_j(t), \quad j = 1, 2, \quad (3.342)$$

і числа $\Psi_{j1,i} \neq 0$.

Визначимо функцію Гріна умов спряження

$$\mathcal{R}_{(v, \alpha); 1j}(t, r) = -\frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} b_2^{-2\alpha_2} u_{v_1, \alpha_1; 21}^{11}(b_1 R_1) V_{(v, \alpha); j}(r, \beta) \Omega_{(v, \alpha)}(\beta) d\beta, \quad (3.343)$$

$$\mathcal{R}_{(v, \alpha); 2j}(t, r) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_1^2}} b_2^{-2\alpha_2} u_{v_1, \alpha_1; 11}^{11}(b_1 R_1) V_{(v, \alpha); j}(r, \beta) \Omega_{(v, \alpha)}(\beta) d\beta,$$

$$j = 1, 2,$$

та функції

$$\begin{aligned} W_j(t, r) = & \int_0^t \left[\mathcal{R}_{(v, \alpha); j1}(t - \tau, r) \omega_1(\tau) + \mathcal{R}_{(v, \alpha); j2}(t - \tau, r) \omega_2(\tau) \right] d\tau + \\ & + \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathcal{R}_{(v, \alpha); j1}(t, r) \Psi_{11,1} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} \mathcal{R}_{(v, \alpha); j2}(t, r) \Psi_{21,1} + \\ & + \mathcal{R}_{(v, \alpha); j1}(t, r) \Psi_{11,2} + \mathcal{R}_{(v, \alpha); j2}(t, r) \Psi_{21,2}, \quad j = 1, 2. \end{aligned} \quad (3.344)$$

Безпосередньо перевіряється, що єдиним розв'язком гіперболічної задачі (3.331), (3.332), (3.342) є функції

$$u_j(t, r) = u_j(t, r) + W_j(t, r), \quad j = 1, 2 \quad (3.345)$$

Тут функції $u_j(t, r)$ визначені формулою (3.341), а функції $W_j(t, r)$ визначені формулою (3.344).

3.8. Гібридні інтегральні перетворення типу Фур'є–Бесселя для необмежених неоднорідних n - складових циліндричних середовищ переносу

Розглянемо сингулярну спектральну задачу Штурма - Ліувілля про конструкцію обмеженого на множині $I_n^+ = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j); R_0 = 0, R_{n+1} = \infty \right\}$ розв'язку системи диференціальних рівнянь Бесселя другого порядку, що описують масоперенос для n - складового неоднорідного циліндричного середовища із врахуванням швидкостей зміни градієнтів параметрів переносу на масообмінних поверхнях

$$(B_{v_k, a_k} + b_k^2) V_{(v, \alpha); k}(r, \beta) = 0, \quad k = \overline{1, n+1} \quad (3.376)$$

за системою n -інтерфейсних умов

$$\left[\left(\tilde{\alpha}_{j1}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) V_{(v, \alpha); k}(r, \beta) - \left(\tilde{\alpha}_{j2}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) V_{(v, \alpha); k+1}(r, \beta) \right] \Big|_{r=R_k} = 0, \quad (3.377)$$

$$j = 1, 2; k = \overline{1, n}.$$

Розв'язок задачі (3.376), (3.377) будемо з використанням ядра Діріхле як фундаментальної системи розв'язків рівняння Бесселя у вигляді [29]:

$$V_{(v, \alpha); 1}(r, \beta) = A_1 J_{v_1, a_1}(b_1 r); V_{(v, \alpha); j}(r, \beta) = A_j J_{v_j, a_j}(b_j r) + B_j N_{v_j, a_j}(b_j r), \quad j = \overline{2, n+1}. \quad (3.378)$$

Інтерфейсні умови (3.177) дають систему $2n$ алгебраїчних рівнянь відносно $(2n+1)$ - го невідомого A_1, A_2, \dots, A_{n+1} та B_2, B_3, \dots, B_{n+1} :

$$\begin{aligned}
u_{v_2, a_2; j2}^{11} (b_2 R_1) A_2 + u_{v_2, a_2; j2}^{12} (b_2 R) &= A_1 u_{v_1, a_1; j1}^{11} (b_1 R_1), j=1, 2; \\
u_{v_k, a_k; j1}^{k1} (b_k R_k) A_k + u_{v_k, a_k; j1}^{k2} (b_k R_k) B_k - \\
-u_{v_{k+1}, a_{k+1}; j2}^{k1} (b_{k+1} R_k) A_{k+1} - u_{v_{k+1}, a_{k+1}; j2}^{k2} (b_{k+1} R_k) B_{k+1} &= 0, k = \overline{2, n}.
\end{aligned} \tag{3.379}$$

Визначник алгебраїчної системи (3.379)

$$\delta_{(v, \alpha); n}(\beta) = \prod_{k=1}^n \delta_{a_{k+1}} \equiv \frac{2}{\pi} \frac{c_{21, k}}{R_k^{2a_{k+1}+1} b_{k+1}^{2a_{k+1}}} \neq 0. \tag{3.380}$$

Поклавши $A_1 = \delta_{(v, \alpha); n}(\beta)$, із алгебраїчної системи (3.379) внаслідок рекурентних співвідношень

$$\begin{aligned}
A_{k+1} &= \frac{1}{\delta_{a_{k+1}}} \left[\Psi_{(v_k, a_k; v_{k+1}, a_{k+1}); 12}^k (b_k R_k, b_{k+1} R_k) A_k + \Psi_{(v_k, a_k; v_{k+1}, a_{k+1}); 22}^k (b_k R_k, b_{k+1} R_k) B_k \right], \\
B_{k+1} &= \frac{1}{\delta_{a_{k+1}}} \left[\Psi_{(v_k, a_k; v_{k+1}, a_{k+1}); 11}^k (b_k R_k, b_{k+1} R_k) A_k + \Psi_{(v_k, a_k; v_{k+1}, a_{k+1}); 21}^k (b_k R_k, b_{k+1} R_k) B_k \right], \tag{3.381}
\end{aligned}$$

знаходимо компоненти спектральної вектор-функції:

$$\begin{aligned}
V_{(v, \alpha); 1}(r, \beta) &= \delta_{(v, \alpha); n}(\beta) J_{v_1, \alpha_1}(b_1 r); b_j(\beta) = a_j^{-1} (\beta^2 + k_j^2)^{\frac{1}{2}}, k_j^2 \geq 0; \\
V_{(v, \alpha); k+1}(r, \beta) &= \left[\prod_{j=k+1}^n \delta_{a_{j+1}}(\beta) \right] [w_{(v, \alpha)_{k+1}; 2}^{(k)}(\beta) J_{v_{k+1}, a_{k+1}}(b_{k+1} r) - \\
w_{(v, \alpha)_{k+1}; 1}^{(k)}(\beta) N_{v_{k+1}, a_{k+1}}(b_{k+1} r)], k &= \overline{1, n-1};
\end{aligned} \tag{3.382}$$

$$\begin{aligned}
V_{(v, \alpha); n+1}(r, \beta) &= w_{(v, \alpha); 23}^{(n)}(\beta) J_{v_{n+1}, a_{n+1}}(b_{n+1} r) - w_{(v, \alpha); 1}^{(n)}(\beta) N_{v_{n+1}, a_{n+1}}(b_{n+1} r), \\
(v, \alpha) &\equiv (v, \alpha)_{n+1} = \{v_1, \alpha_1; v_2, \alpha_2; \dots; v_n, \alpha_n; v_{n+1}, \alpha_{n+1};\}
\end{aligned}$$

Наявність спектральної функції

$$V_{(v, \alpha)}(r, \beta) = \sum_{k=1}^n V_{(v, \alpha); k}(r, \beta) \Theta(r - R_{k-1}) \Theta(R_k - r) + V_{(v, \alpha); n+1}(r, \beta) \Theta(r - R_n),$$

спектральної густини

$$\Omega_{(v, \alpha)}(\beta) = \beta b_{n+1}^{2a_{n+1}} \left(\left[\omega_{(v, \alpha); 1}^{(n)}(\beta) \right]^2 + \left[\omega_{(v, \alpha); 2}^{(n)}(\beta) \right]^2 \right)^{-1}$$

та вагової функції

$$\sigma(r) = \sum_{k=1}^n \sigma_k r^{2\alpha_{k+1}} \Theta(r - R_{k-1}) \Theta(R_k - r) + \sigma_{n+1} r^{2\alpha_{n+1}+1} \Theta(r - R_n)$$

дає можливість написати інтегральне зображення міри Дірака на множині I_n^+ :

$$\delta(r - \rho) = \int_0^\infty V_{(v,\alpha)}(r, \beta) V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \sigma(\rho) \quad (3.383)$$

Тут

$$\sigma_k = \frac{c_{11,k} c_{11,k+1} \dots c_{11,n}}{c_{21,k} c_{21,k+1} \dots c_{21,n}} \frac{R_k^{2\alpha_{k+1}+1} R_{k+1}^{2\alpha_{k+2}+1} \dots R_n^{2\alpha_{n+1}+1}}{R_k^{2\alpha_k+1} R_{k+1}^{2\alpha_{k+1}+1} \dots R_n^{2\alpha_{n+1}+1}} \frac{1}{a_k^2}; \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{a_{n+1}^2}.$$

Інтегральне зображення (3.383) міри Дірака породжує пряме $\mathcal{H}_{(v,\alpha);n}$ і обернене $\mathcal{H}_{(v,\alpha);n}^{-1}$ гібридне інтегральне перетворення Фур'є – Бесселя із спектральним параметром для необмеженого неоднорідного n - складового середовища :

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);n} [q(r)] = \int_0^\infty q(r) V_{(v,\alpha)}(r, \beta) \sigma(r) dr \equiv \tilde{q}(\beta) \quad (3.384)$$

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);n}^{-1} [\tilde{q}(\beta)] = \int_0^\infty \tilde{q}(\beta) V_{(v,\alpha)}(r, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \equiv q(r) \quad (3.385)$$

Математичним обґрунтуванням рівностей (3.384), (3.385) є теорема про інтегральне зображення.

Теорема 3.8.1: (про інтегральне зображення): Нехай виконуються співвідношення

$$c_{11,k} c_{21,k} > 0, c_{j1,j2}^{12,k} = c_{j1,j2}^{21,k}, c_{j2}^k = 0, j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (3.386)$$

та функція $f(r) = g(r) \left[\sum_{k=1}^n r^{\alpha_k+1/2} \Theta(r - R_{k-1}) \Theta(R_k - r) + r^{\alpha_{n+1}+1/2} \Theta(r - R_n) \right]$ є неперервна, абсолютно сумовна і має обмежену варіацію на множині $(0, \infty)$. Тоді для будь-якого $r \in I_n^+$ справджується інтегральне зображення:

$$g(r) = \int_0^\infty V_{(v,\alpha)}(r, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \int_0^\infty g(\rho) V_{(v,\alpha)}(\rho, \beta) \sigma(\rho) d\rho \quad (3.387)$$

Доведення: Для $\lambda \neq \beta \in (0, \infty)$ розглянемо функції $V_{\nu\alpha_j}(r, \beta)$ та $V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda)$. При виконанні співвідношень (3.386) внаслідок інтерфейсних умов (3.377) маємо тотожність

$$\begin{aligned} & \left[V'_{\nu\alpha_j}(r, \beta) V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) - V_{\nu\alpha_j}(r, \beta) V'_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) \right]_{r=R_j} = \\ & = \frac{C_{21,j}}{C_{11,j}} \left[V'_{\nu\alpha_{j+1}}(r, \beta) V_{\nu\alpha_{j+1}}(r, \lambda) - V_{\nu\alpha_{j+1}}(r, \beta) V'_{\nu\alpha_{j+1}}(r, \lambda) \right]_{r=R_j}, j = \overline{1, n}. \end{aligned} \quad (3.388)$$

Функції $V_{\nu\alpha_j}(r, \beta)$ та $V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda)$ за побудовою задовольняють диференціальні рівняння:

$$\left[B_{\nu\alpha_j} + (\beta^2 + k_j^2) D_j^{-1} \right] V_{\nu\alpha_j}(r, \beta) = 0, \quad (3.389)$$

$$\left[B_{\nu\alpha_j} + (\lambda^2 + k_j^2) D_j^{-1} \right] V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) = 0, j = \overline{1, n+1}. \quad (3.390)$$

Помножимо рівняння (3.389) на функцію $r^{2\alpha_j+1} V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda)$, а рівняння (3.390) на функцію $r^{2\alpha_j+1} V_{\nu\alpha_j}(r, \beta)$ і віднімемо від першого друге:

$$r^{2\alpha_j+1} V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) V_{\nu\alpha_j}(r, \beta) = \frac{D_j}{\beta^2 - \lambda^2} \frac{d}{dr} \left[r^{2\alpha_j+1} V_{\nu\alpha_j}(r, \beta) \frac{d}{dr} V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) - V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) \frac{d}{dr} V_{\nu\alpha_j}(r, \beta) \right], j = \overline{1, n+1} \quad (3.391)$$

Задамо досить велике число $R > R_n$. Внаслідок властивостей функцій

$V_j(z, \beta) V_j(z, \lambda)$, структури сталих σ_k і рівності (3.391) маємо, що

$$\begin{aligned} & \int_0^R V_{\nu\alpha_j}(r, \beta) V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) \sigma(r) dr = \\ & = \sum_{j=1}^n \int_{R_{j-1}}^{R_j} V_{\nu\alpha_j}(r, \beta) V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) \sigma_j r^{2\alpha_j+1} dr + \int_{R_n}^R V_{\nu\alpha_j}(r, \beta) V_{\nu\alpha_j}(r, \lambda) \sigma_{n+1} r^{2\alpha_{n+1}+1} dr = . \quad (3.392) \\ & = \frac{R^{2\alpha_{n+1}+1}}{\beta^2 - \lambda^2} \left[V_{\nu\alpha_{n+1}}(A, \beta) V'_{\nu\alpha_{n+1}}(A, \lambda) - V_{\nu\alpha_{n+1}}(A, \lambda) V'_{\nu\alpha_{n+1}}(A, \beta) \right] \end{aligned}$$

Позаінтегральний член на межі $r=0$ рівний нулеві внаслідок виконання крайової умови в точці $r=0$ функцією $V_{\nu\alpha_1}(r, \beta)$ позаінтегральні члени в $r = R_k$ перетворюється в нуль внаслідок вибору σ_k та інтерфейсних умов. Для довільних додатніх чисел c і d ($c < d$) та довільної обмеженої на сегменті $[c, d]$ функції $f(\beta)$, обчислимо подвійний інтеграл

$$J = \int_0^\infty \int_c^d f(\beta) V_{\nu\alpha}(r, \beta) \Omega_{\nu\alpha_n}(\beta) d\beta V_{\nu\alpha}(r, \lambda) \sigma(r) =$$

$$= \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{R_0}^A \int_c^d f(\beta) V_{\nu\alpha}(r, \beta) \Omega_{\nu\alpha}(\beta) d\beta V_{\nu\alpha}(r, \lambda) \sigma(r) dr$$
(3.393)

Внаслідок рівності (3.192) подвійний інтеграл (3.193) набуває вигляду :

$$J = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_c^d f(\beta) \frac{R^{2\alpha_{n+1}+1}}{\beta^2 - \lambda^2} \left[V_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \beta) V'_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \lambda) - V_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \lambda) V'_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \beta) \right] \Omega_{\nu\alpha_n}(\beta) d\beta.$$
(3.394)

Оскільки $d > c > 0$, то для обчислення границі (3.394) скористуємося для функцій $V_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \beta)$ та $V'_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \beta)$ асимптотичними формулами для великих значень аргументу R , використовуючи при цьому асимптотику для циліндричних функцій першого і другого роду дійсного аргументу [6]:

$$J_{\nu\alpha}(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} x^{-(\alpha+1/2)} \cos\left(x - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right); N_{\nu\alpha}(x) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} x^{-(\alpha+1/2)} \sin\left(x - \frac{\pi\nu}{2} - \frac{\pi}{4}\right)$$

Безпосередньо отримуємо:

$$V_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \beta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} (b_{n+1}(\beta)R)^{-(\alpha+1/2)} \left[\omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) \cos\left(b_{n+1}(\beta)R - \frac{\pi\nu_{n+1}}{2} - \frac{\pi}{4}\right) - \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) \sin\left(b_{n+1}(\beta)R - \frac{\pi\nu_{n+1}}{2} - \frac{\pi}{4}\right) \right];$$

$$V'_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \beta) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi}} (b_{n+1}(\beta)R)^{-(\alpha+1/2)} \left[\left(\frac{\nu_{n+1} - \alpha_{n+1}}{R} \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) - b_{n+1}(\beta) \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) \right) \cos\left(b_{n+1}(\beta)R - \frac{\pi}{2} \left(\nu_{n+1} + \frac{1}{2} \right) \right) \right. \\ \left. - \left(\frac{\nu_{n+1} - \alpha_{n+1}}{R} \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) + b_{n+1}(\beta) \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) \right) \sin\left(b_{n+1}(\beta)R - \frac{\pi}{2} \left(\nu_{n+1} + \frac{1}{2} \right) \right) \right].$$

У результаті перетворень отримаємо:

$$G_{n+1}(R, \beta, \lambda) = V_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \beta) V'_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \lambda) - V_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \lambda) V'_{\nu\alpha_{n+1}}(R, \beta) \approx \frac{1}{\pi} \frac{R^{-(2\alpha_{n+1}+1)}}{(b_{n+1}(\lambda) b_{n+1}(\beta))^{\alpha_{n+1}+1/2}} \cdot$$

$$\left\{ z_{n+1}^+ \left[\omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\lambda) + \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\lambda) \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) \right] \sin R z_{n+1}^- + z_{n+1}^+ \left[\omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\lambda) - \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\lambda) \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) \right] \cos R z_{n+1}^- + \right.$$

$$\left. + z_{n+1}^- \left[\omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\lambda) + \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\lambda) \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) \right] \sin(R z_{n+1}^- - \pi \nu_{n+1}) + z_{n+1}^- \left[\omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\lambda) - \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\lambda) \right] \cos(R z_{n+1}^+ - \pi \nu_{n+1}) \right\}$$

$$z_{n+1}^\pm = b_{n+1}(\beta) \pm b_{n+1}(\lambda).$$
(3.395)

Тут

$$V_{\nu\alpha_{n+1}}(r, \beta) = \omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) \cdot J_{\nu\alpha_{n+1}}(b_{n+1}r) - \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) \cdot N_{\nu\alpha_{n+1}}(b_{n+1}r),$$

$$\frac{\partial}{\partial r} V_{\nu\alpha_k}(b_s r)_{r=R_k} = \frac{\nu - \alpha}{R_k} \left(\omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) J_{\nu\alpha}(b_s R_k) - \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) N_{\nu\alpha}(b_s R_k) \right) - b_s^2 R_k \left(\omega_{\nu\alpha_{n,2}}(\beta) J_{\nu+1, \alpha+1}(b_s R_k) - \omega_{\nu\alpha_{n,1}}(\beta) N_{\nu+1, \alpha+1}(b_s R_k) \right)$$

$$\frac{\partial}{\partial r} J_{\nu\alpha}(b_s r)_{r=R_k} = \frac{\nu-\alpha}{R_k} J_{\nu\alpha}(b_s R_k) - b_s^2 R_k J_{\nu+1,\alpha+1}(b_s R_k); \frac{\partial}{\partial r} N_{\nu\alpha}(b_s r)_{r=R_k} = \frac{\nu-\alpha}{R_k} N_{\nu\alpha}(b_s R_k) - b_s^2 R_k N_{\nu+1,\alpha+1}(b_s R_k)$$

У припущенні, що функція $\psi(\beta)$ неперервна, абсолютно інтегрована й має обмежену варіацію на множині $[c, d]$, підстановка (3.395) в (3.394) з подальшим використанням лем Рімана й Діріхле [32] приводить до граничної рівності

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \int_c^d f(\beta) \frac{R^{2\alpha_{n+1}+1}}{\beta^2 - \lambda^2} G_{n+1}(R, \beta, \lambda) \Omega_{\nu\alpha_n}(\beta) d\beta \sigma(r) dr = \begin{cases} f(\lambda), & \lambda \in [c, d], \\ 0, & \lambda \notin [c, d]. \end{cases}$$

Якщо ж функція $f(\beta)$ володіє вище вказаним властивостями на проміжку $[0, \infty)$, то одержуємо подвійний інтеграл

$$\int_0^\infty \int_0^\infty \psi(\beta) V_{\nu\alpha}(r, \beta) V_{\nu\alpha}(r, \lambda) \Omega_n(\beta) d\beta \sigma(r) dr = \begin{cases} \psi(\lambda), & \lambda \in [0, \infty) \\ 0, & \lambda \notin [0, \infty) \end{cases}. \quad (3.396)$$

Припустимо, що вектор - функція $g(r)$ має вигляд

$$g(r) = \int_0^\infty f(\beta) V_{\nu\alpha}(r, \beta) \Omega_{\nu\alpha_n}(\beta) d\beta. \quad (3.397)$$

Помножимо (3.397) на $V_{\nu\alpha}(r, \lambda) \sigma(r) dr$, де λ - довільне додатне число і проінтегруємо від $r=0$ до $r=\infty$. На основі рівності (3.396) одержимо, що

$$\int_{R_0}^\infty g(r) V_{\nu\alpha}(r, \lambda) \sigma(r) dr = f(\lambda) S_+(\lambda); \quad S_+(\lambda) = \begin{cases} 1, & \lambda > 0, \\ 0, & \lambda < 0. \end{cases}$$

Якщо тепер підставити функцію $f(\beta) = \int_{R_0}^\infty g(\rho) V_{\nu\alpha}(\rho, \beta) \sigma(\rho) d\rho$ в рівність

(3.397), то одержимо формулу (3.387) - інтегральне зображення вектор- функції $g(r) = \{g_1(r), g_2(r), \dots, g_{n+1}(r)\}$. Доведення теореми завершено.

Зауваження: Якщо функція $q(r)$ кусково – неперервна, то в лівій частині

$$(3.386) \text{ замість } q(r) \text{ стоятиме } \frac{1}{2} [q(r-0) + q(r+0)].$$

Побудова алгебри гібридного диференціального оператора Бесселя

$$B_{(\nu, \alpha)} = \sum_{j=1}^n a_j^2 \Theta(r - R_{j-1}) \Theta(R_j - r) B_{\nu_j, \alpha_j} + a_{n+1}^2 \Theta(r - R_n) B_{\nu_{n+1}, \alpha_{n+1}}, \quad R_0 = 0$$

ґрунтується на основній тотожності інтегрального перетворення оператора $B_{(\nu, \alpha)}$.

Теорема 3.8.2 (про основну тотожність): Припустимо, що функція

$$f(r) = \{B_{v_1, \alpha_1} [q_1(r)]; B_{v_2, \alpha_2} [q_2(r)]; \dots; B_{v_n, \alpha_n} [q_n(r)]\}$$

неперервно диференційована на множині I_n^+ , вектор – функція

$q(r)$ задовольняє систему інтерфейсних умов

$$\left[\left(\tilde{a}_{j1}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j1}^k \right) q_k(r) - \left(\tilde{a}_{j2}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{j2}^k \right) q_{k+1}(r) \right] \Big|_{r=R_k} = 0; \quad j=1,2; \quad k=\overline{1,n} \quad (3.398)$$

та умови обмеженості

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^{2\alpha_1+1} \left(q_1'(r) V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) - q_1(r) V'_{(v,\alpha);1}(r, \beta) \right) = 0, \quad (3.399)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{2\alpha_{n+1}+1} \left(q_{n+1}'(r) V_{(v,\alpha);n+1}(r, \beta) - q_{n+1}(r) V'_{(v,\alpha);n+1}(r, \beta) \right) = 0. \quad (3.400)$$

Якщо для $k=\overline{1,n}$ виконуються рівності

$$\Psi_{jk} \equiv \left[\delta_{j1}^k q_k'(r) + \gamma_{j1}^k q_k(r) \right] \Big|_{r=R_k} - \left[\delta_{j2}^k q_{k+1}'(r) + \gamma_{j2}^k q_{k+1}(r) \right] \Big|_{r=R_k} = 0, \quad j=1,2; \quad k=\overline{1,n}, \quad (3.401)$$

то має місце основна тотожність інтегрального перетворення гібридного диференціального оператора $B_{(v,\alpha)}$:

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);n} \left[B_{(v,\alpha)} [q(r)] \right] = -\beta^2 \tilde{q}(\beta) - \sum_{j=1}^{n+1} k_j^2 \int_{R_{j-1}}^{R_j} q_j(r) V_{(v,\alpha);j}(r, \beta) \sigma_j r^{2\alpha_j+1} dr, \quad R_0 = 0, \quad R_{n+1} = \infty. \quad (3.402)$$

Доведення: З інтерфейсних умов для $V_{(v,\alpha)}(r, \beta)$ та $g(r)$ внаслідок співвідношень (3.386) встановлюємо базову тотожність

$$\begin{aligned} & \left[q_k'(r) V_{(v,\alpha);k}(r, \beta) - q_k(r) V'_{(v,\alpha);k}(r, \beta) \right] \Big|_{r=R_k} = \\ & = \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} \left[q_{k+1}'(r) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta) - q_{k+1}(r) V'_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta) \right] \Big|_{r=R_k}; \quad k=\overline{1,n}. \end{aligned} \quad (3.403)$$

Інтегруючи два рази частинами під знаком інтегралів в лівій частині рівності (3.403), маємо:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{(v,\alpha);n} \left[B_{(v,\alpha)}[q(r)] \right] &\equiv \sum_{j=1}^{n+1} a_j^2 \int_{R_{j-1}}^{R_j} B_{v,j,\alpha_j} \left[q_j(r) \right] V_{(v,\alpha);j}(r,\beta) \sigma_j r^{2\alpha_j+1} dr = \\
&= -\lim_{r \rightarrow 0} a_1^2 \sigma_1 r^{2\alpha_1+1} \left(q'_1(r) V_{(v,\alpha);1}(r,\beta) - q_1(r) V'_{(v,\alpha);1}(r,\beta) \right) + \\
&+ \lim_{r \rightarrow \infty} r^{2\alpha_{n+1}+1} \left(q'_{n+1}(r) V_{(v,\alpha);n+1}(r,\beta) - q_{n+1}(r) V'_{(v,\alpha);n+1}(r,\beta) \right) + \\
&+ \sum_{j=1}^n \left[a_j^2 \sigma_j r^{2\alpha_j+1} \left(q'_j(r) V_{(v,\alpha);j}(r,\beta) - q_j(r) V'_{(v,\alpha);j}(r,\beta) \right) - \right. \\
&\left. - a_{j+1}^2 \sigma_{j+1} r^{2\alpha_{j+1}+1} \left(q'_{j+1}(r) V_{(v,\alpha);j+1}(r,\beta) - q_{j+1}(r) V'_{(v,\alpha);j+1}(r,\beta) \right) \right] \Big|_{r=R_j} + \\
&+ \sum_{j=1}^{n+1} a_j^2 \int_{R_{j-1}}^{R_j} q_1(r) B_{v,j,\alpha_j} \left[V_{(v,\alpha);j}(r,\beta) \right] \sigma_j r^{2\alpha_j+1} dr
\end{aligned} \tag{3.404}$$

Внаслідок умов обмеження (3.388), (3.389) перші два доданки рівні нулю. Внаслідок структури $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n, \sigma_{n+1}$ та базової тотожності (3.403) доданок в квадратній дужці під знаком суми перетворюється в нуль. Якщо $a_j^2 B_{v,j,\alpha_j} \left[V_{(v,\alpha);j}(r,\beta) \right]$ замінити на $\left[-(\beta^2 + k_j^2) V_{(v,\alpha);j}(r,\beta) \right]$ під знаком інтеграла й розкласти одержану суму на два доданки, то одержимо тотожність (3.402). Якщо рівності (3.401) не виконуються, то базова тотожність (3.403) набуває вигляду:

$$\begin{aligned}
&\left[q'_k(r) V_{(v,\alpha);k}(r,\beta) - q_k(r) V'_{(v,\alpha);k}(r,\beta) \right] \Big|_{r=R_k} = \\
&= \frac{c_{21,k}}{c_{11,k}} \left[q'_{k+1}(r) V_{(v,\alpha);k+1}(r,\beta) - q_{k+1}(r) V'_{(v,\alpha);k+1}(r,\beta) \right] \Big|_{r=R_k} + \\
&+ \frac{1}{c_{11,k}} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r,\beta) \right] \Big|_{r=R_k} \Psi_{2k} - \\
&- \left[\left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r,\beta) \right] \Big|_{r=R_k} \Psi_{1k}, k = \overline{1, n}.
\end{aligned} \tag{3.405}$$

Внаслідок цього основна тотожність (3.402) має структуру:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{(v,\alpha);n} \left[B_{(v,\alpha)} \left[q(r) \right] \right] = & -\beta^2 \tilde{q}(\beta) - \sum_{j=1}^{n+1} k_j^2 \int_{R_{j-1}}^{R_{j+1}} q_1(r) V_{(v,\alpha);j}(r, \beta) \times \\
& \times \sigma_j r^{2\alpha_j+1} dr + \sum_{k=1}^n c_{11,k}^{-1} \alpha_k^2 \sigma_k R_k^{2\alpha_k+1} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta) \right]_{r=R_k} \Psi_{2k} - \\
& - \left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta) \Big|_{r=R_k} \Psi_{1k}, \quad R_0 = 0, \quad R_{n+1} = \infty.
\end{aligned} \tag{3.406}$$

Тотожності (3.402), (3.406) дають можливість застосовувати запроваджені формулами (3.384), (3.385) гібридні інтегральні перетворення Фур'є – Бесселя із спектральним параметром до побудови точних аналітичних розв'язків відповідних сингулярних задач, що є математичними моделями масопереносу для необмежених по радіальній координаті r неоднорідних циліндричних середовищ за поданою нижче логічною схемою.

Квазістатична модель. Розглядається крайова задача: побудувати обмежений в області $D_n^+ = \{(t, r); t \in (0, \infty), r \in I_n^+\}$ розв'язок системи рівнянь масопереносу параболічного типу для необмеженого (по радіальній координаті r) n – складового циліндричного середовища з врахуванням швидкостей зміни градієнтів концентрацій на масообмінних поверхнях $r = R_k, k = 0, n$:

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_j^2 - a_j^2 B_{vj, \alpha_j} \right) u_j(t, r) = f_j(t, r), \quad j = \overline{1, n+1} \tag{3.407}$$

за початковими умовами

$$u_j(t, r) \Big|_{t=0} = q_j(r), \quad r \in (R_{j-1}, R_j), \quad j = \overline{1, n+1}; \quad R_0 = 0, \quad R_{n+1} = \infty \tag{3.408}$$

та системою інтерфейсних умов

$$\left(L_{j1}^m [u_m(t, r)] - L_{j2}^m [u_{m+1}(t, r)] \right) \Big|_{r=R_m} = 0; \quad j = 1, 2; \quad m = \overline{1, n}. \tag{3.409}$$

Розв'язання: Запишемо систему (3.407) і початкові умови (3.408) у матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_1^2 - a_1^2 B_{v_1, \alpha_1} \right) u_1(t, r) \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_2^2 - a_2^2 B_{v_2, \alpha_2} \right) u_2(t, r) \\ \dots\dots\dots \\ \left(\frac{\partial}{\partial t} + \gamma_{n+1}^2 - a_{n+1}^2 B_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}} \right) u_{n+1}(t, r) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, r) \\ f_2(t, r) \\ \dots\dots\dots \\ f_{n+1}(t, r) \end{bmatrix}; \quad (3.410)$$

$$\begin{bmatrix} u_1(t, r) \\ u_2(t, r) \\ \dots\dots\dots \\ u_{n+1}(t, r) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} q_1(r) \\ q_2(r) \\ \dots\dots\dots \\ q_{n+1}(r) \end{bmatrix}.$$

Інтегральний оператор $\mathcal{H}_{(v,a);n}$, який діє за правилом (3.384), зобразимо у вигляді операторної матриці – рядка:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{(v,a);n} [\dots] = & \left[\int_0^{R_1} \dots V_{(v,a);1}(r, \beta) \sigma_1 r^{2a_1+1} dr \int_{R_1}^{R_2} \dots V_{(v,a);2}(r, \beta) \sigma_2 r^{2a_2+1} dr \dots \right. \\ & \left. \dots \int_{R_{n-1}}^{R_n} \dots V_{(v,a);n}(r, \beta) \sigma_n r^{2a_n+1} dr \int_{R_n}^{\infty} \dots V_{(v,a);n+1}(r, \beta) \sigma_{n+1} r^{2a_{n+1}+1} dr \right] \end{aligned} \quad (3.411)$$

Припустимо, що $\max \{ \gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_n^2; \gamma_{n+1}^2 \} = \gamma_{n+1}^2$. Покладемо

$k_j^2 = \gamma_{n+1}^2 - \gamma_j^2 \geq 0, j = \overline{1, n+1}$. Застосуємо за правилом множення матриць операторну матрицю – рядок (3.411) до задачі Коші. Внаслідок тотожності (3.402) одержуємо задачу Коші:

$$\left(\frac{d}{dt} + \beta^2 + \gamma_{n+1}^2 \right) \tilde{u}(t, \beta) = \tilde{f}(t, \beta), \tilde{u}(t, \beta) \Big|_{t=0} = \tilde{q}(\beta). \quad (3.412)$$

Розв'язком задачі Коші (3.212) є функція

$$\begin{aligned} \tilde{u}(t, \beta) = & \int_0^t e^{-(\beta^2 + \gamma_{n+1}^2)(t-\tau)} [\tilde{f}(\tau, \beta) + \delta_+(\tau) \tilde{q}(\beta)] d\tau, \\ \tilde{f}(t, \beta) = & \sum_{j=1}^{n+1} \tilde{f}_j(t, \beta); \tilde{q}(\beta) \sum_{j=1}^{n+1} q_j(\beta). \end{aligned} \quad (3.413)$$

Інтегральний оператор $\mathcal{H}_{(v,a);n}^{-1}$, який діє за правилом (3.385), як обернений до (3.411) зобразимо у вигляді операторної матриці – стовпця:

$$\mathcal{H}_{(v,a);n}^{-1} [\dots] = \begin{bmatrix} \int_0^\infty \dots V_{(v,\alpha);1}(r, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \\ \int_0^\infty \dots V_{(v,\alpha);2}(r, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \\ \dots \dots \dots \int_0^\infty \dots V_{(v,\alpha);n+1}(r, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta \end{bmatrix}. \quad (3.414)$$

Визначимо функції впливу

$$\mathcal{H}_{(v,a);jk}(t, r, p) = \int_0^\infty e^{-(\beta_n^2 + \gamma_{n+1}^2)t} V_{(v,\alpha);j}(r, \beta) V_{(v,\alpha);k}(\rho, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta; \quad j, k = \overline{1, n+1}. \quad (3.415)$$

Застосувавши до матриці – елемента $[\tilde{u}(t, \beta)]$, де функція $\tilde{u}(t, \beta)$ визначена за формулою (3.413), за правилом множення матриць операторну матрицю – стовпець (3.414), у результаті елементарних перетворень одержуємо функції

$$u_j(t, r) = \sum_{m=1}^n \int_0^t \int_{R_{m-1}}^{R_m} \mathcal{H}_{(v,a);jm}(t - \tau, r, \rho) [f_m(\tau, \rho) + \delta_+(\tau) q_m(\rho) \sigma_m \rho^{2a_m+1} d\rho d\tau, \quad j = \overline{1, n+1}, R_0 = 0, R_{n+1} = \infty, \quad (3.416)$$

які повністю визначають єдиний розв'язок параболічної задачі (3.407) – (3.409). Тут $\delta_+(\tau)$ - дельта – функція (міра Дірака), зосереджена в точці $t = 0_+$.

Ми припустили, що для $j=1, 2$, $k = \overline{1, n}$ числа

$$\Psi_{jk} = \left[\left(\delta_{j1}^k q'_k(r) + \gamma_{j1}^k q_k(r) \right) \Big|_{r=R_k} - \left(\delta_{j2}^k q'_{k+1}(r) + \gamma_{j2}^k q_{k+1}(r) \right) \Big|_{r=R_k} \right] = 0.$$

Нехай $\Psi_{jk} \neq 0$ і інтерфейсні умови (3.409) неоднорідні

$$\left(L_{j1}^k [u_k(t, r)] - L_{j2}^k [u_{k+1}(t, r)] \right) \Big|_{r=R_k} = \omega_{jk}(t); \quad j = 1, 2; \quad k = \overline{1, n}. \quad (3.417)$$

Визначимо функції Гріна інтерфейсних умов

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{(v,a);jk}^{(1)}(t, r) &= -d_k \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma_{n+1}^2)t} \left[\left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta) \Big|_{r=R_k} \right] V_{(v,\alpha);j}(r, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta; \quad j = \overline{1, n+1}, k = \overline{1, n}; \\ \mathcal{R}_{(v,a);jk}^{(2)}(t, r) &= d_k \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma_{n+1}^2)t} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta) \right] V_{(v,\alpha);j}(r, \beta) \Omega_{(v,\alpha)}(\beta) d\beta; \quad d_k = c_{11,k}^{-1} a_k^2 \sigma_k R_k^{2a_k+1}; \end{aligned} \quad (3.418)$$

та функції

$$W_j(t, r) = \sum_{k=1}^n \left\{ \int_0^t [\mathcal{R}_{(v,a);jk}^{(1)}(t-\tau, r) \omega_{1k}(\tau) + \mathcal{R}_{(v,a);jk}^{(2)}(t-\tau, r) \omega_{2k}(\tau)] d\tau + \right. \\ \left. + \mathcal{R}_{(v,a);jk}^{(1)}(t, r) \Psi_{1,k} + \mathcal{R}_{(v,a);jk}^{(2)}(t, r) \Psi_{2,k} \right\}, j = \overline{1, n+1}. \quad (3.419)$$

Загальний розв'язок параболічної задачі масопереносу (3.407), (3.408), (3.406) визначають функції

$$v_j(t, r) = u_j(t, r) + W_j(t, r), j = \overline{1, n+1}. \quad (3.420)$$

Тут функції $u_j(t, r)$ визначені формулою (3.416), а функції $W_j(t, r)$ - формулою (3.419).

Динамічна модель: Побудувати обмежений в області D_m^+ розв'язок системи рівнянь масопереносу гіперболічного типу для необмеженого (по радіальній координаті r) n - складового неоднорідного циліндричного середовища з врахуванням зміни швидкостей градієнтів концентрацій масообмінних розділу $r = R_k, k = 0, n$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma_j^2 - a_j^2 B_{v_j, a_j} \right) u_j(t, r) = f_j(t, r), j = \overline{1, n+1} \quad (3.421)$$

за початковими умовами

$$u_j(t, r)|_{t=0} = q_{j1}(r), \frac{\partial u_j}{\partial t}|_{t=0} = q_{j2}(r), r \in (R_{j-1}, R_j), j = \overline{1, n+1} \quad (3.422)$$

та системою інтерфейсних умов

$$\left(\Theta_{j1}^k [u_k(t, r)] - \Theta_{j2}^k [u_{k+1}(t, r)] \right) \Big|_{r=R_k} = 0; j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (3.423)$$

тут беруть участь диференціальні оператори

$$\Theta_{jm}^k = \left(\alpha_{jm}^k + \delta_{jm}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{jm}^k + \gamma_{jm}^k \frac{\partial^2}{\partial t^2}; j, m = 1, 2; k = \overline{1, n}.$$

Розв'язання: Будемо вважати, що для початкових функцій мають місце рівності

$$\alpha_{jk}^m \equiv \left(\left[\delta_{j1}^k q'_{km}(r) + \gamma_{j1}^k q_{km}(r) \right] - \left[\delta_{j2}^k q'_{k+1,m}(r) + \gamma_{j2}^k q_{k+1,m}(r) \right] \right) \Big|_{r=R_k} = 0; \\ j, m = 1, 2; k = \overline{1, n}. \quad (3.424)$$

Запишемо систему (3.421) і початкові умови (3.422) у матричній формі:

$$\begin{bmatrix} \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma_1^2 - a_1^2 B_{v_1, \alpha_1} \right) u_1(t, r) \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma_2^2 - a_2^2 B_{v_2, \alpha_2} \right) u_2(t, r) \\ \dots\dots\dots \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma_{n+1}^2 - a_{n+1}^2 B_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}} \right) u_{n+1}(t, r) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_1(t, r) \\ f_2(t, r) \\ \dots\dots\dots \\ f_{n+1}(t, r) \end{bmatrix}; \quad (3.425)$$

$$\begin{bmatrix} u_1(t, r) \\ u_2(t, r) \\ \dots\dots\dots \\ u_{n+1}(t, r) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} q_{11}(r) \\ q_{12}(r) \\ \dots\dots\dots \\ q_{1, n+1}(r) \end{bmatrix}; \quad \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} u_1(t, r) \\ u_2(t, r) \\ \dots\dots\dots \\ u_{n+1}(t, r) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = \begin{bmatrix} q_{21}(r) \\ q_{22}(r) \\ \dots\dots\dots \\ q_{2, n+1}(r) \end{bmatrix}. \quad (3.426)$$

У припущенні, що $\max \{ \gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_n^2; \gamma_{n+1}^2 \} = \gamma_{n+1}^2$, застосуємо до задачі (3.415), (3.416) за правилом множення матриць операторну матрицю – рядок (3.409). Внаслідок тотожності (3.402) одержуємо задачу Коші:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \beta^2 + \gamma_{n+1}^2 \right) \tilde{u}(t, \beta) = \tilde{f}(t, \beta); \tilde{u}(t, \beta) \Big|_{t=0} = \tilde{q}_1(\beta), \quad \frac{d\tilde{u}}{dt} \Big|_{t=0} = \tilde{q}_2(\beta). \quad (3.427)$$

Розв'язком задачі Коші (3.421) є функція

$$\begin{aligned} \tilde{u}(t, \beta) = & \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2}} \tilde{q}_2(\beta) + \frac{d}{dt} \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2}} \tilde{q}_1(\beta) + \\ & \int_0^t \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2} (t - \tau)}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2}} \tilde{f}(\tau, \beta) d\tau. \end{aligned} \quad (3.428)$$

Визначимо функції впливу:

$$\mathcal{H}_{(v,a);jk}(t, r, \rho) = \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2}} V_{(v,a);j}(r, \beta) V_{(v,a);k}(\rho, \beta) \Omega_{(v,a)}(\beta) d\beta; \quad j, k = \overline{1, n+1}. \quad (3.429)$$

У результаті застосування до матриці – елемента $[\tilde{u}(t, \beta)]$, де функція $\tilde{u}(t, \beta)$ визначена формулою (3.428), за правилом множення матриць операторної матриці – стовпця (3.412) отримуємо функції

$$\begin{aligned}
u_j(t, r) = & \sum_{m=1}^{n+1} \int_0^t \int_{R_{m-1}}^{R_m} \mathcal{H}_{(v,a);jm}(t-\tau, r, \rho) [f_m(\tau, \rho) + \delta_+(\tau) q_{2m}(\rho)] \times \\
& \times \sigma_m \rho^{2a_m+1} d\rho d\tau + \frac{\partial}{\partial t} \sum_{m=1}^{n+1} \int_{R_{m-1}}^{R_m} \mathcal{H}_{(v,a);jm}(t, r, \rho) q_{1m}(\rho) \sigma_m \rho^{2a_m+1} d\rho, \\
j = \overline{1, n+1}, R_0 = 0, R_{n+1} = \infty,
\end{aligned} \tag{3.430}$$

які повністю описують єдиний розв'язок гіперболічної задачі (3.421) – (3.423).

Зауваження: При $\delta_{jm}^k = 0, \gamma_{jm}^k = 0 (j, m = 1, 2; k = \overline{1, n})$ одержуємо безпосередньо результат роботи [19].

Ми припустили, що числа $\psi_{jk,i} \equiv \left[\left(\delta_{j1}^k q'_{ki}(r) + \gamma_{j1}^k q'_{ki}(r) - \left(\delta_{j2}^k q'_{k+1,i}(r) + \gamma_{j2}^k q'_{k+1,i}(r) \right) \right) \right] \Big|_{r=R_k} = 0$, $j, i = 1, 2; k = \overline{1, n}$. Нехай тепер інтерфейсні умови (3.423) неоднорідні:

$$(\Theta_{j1}^k [u_k(t, r)] - \Theta_{j2}^k [u_{k+1}(t, r)]) \Big|_{r=R_k} = \omega_{jk}(t); j = 1, 2; k = \overline{1, n}. \tag{3.431}$$

Безпосередньо перевіряється, що загальний розв'язок гіперболічної задачі розглядуваного масопереносу (3.221), (3.222), (3.231) описують функції

$$v_j(t, r) = u_j(t, r) + W_j(t, r), \quad j = \overline{1, n+1}. \tag{3.432}$$

Тут функції $u_j(t, r)$ визначені формулою (3.230), функції $W_j(t, r)$ визначені формулою.

$$\begin{aligned}
W_j(t, r) = & \sum_{k=1}^n \left\{ \int_0^t \left[R_{(v,a);jk}^{(1)}(t-\tau, r) \omega_{1,k}(\tau) + R_{(v,a);jk}^{(2)}(t-\tau, r) \omega_{2,k}(\tau) \right] d\tau + \right. \\
& + \frac{\partial^2}{\partial t^2} R_{(v,a);jk}^{(1)}(t, r) \Psi_{1k,1} + \frac{\partial^2}{\partial t^2} R_{(v,a);jk}^{(2)}(t, r) \Psi_{2k,1} + R_{(v,a);jk}^{(1)}(t, r) \Psi_{1k,2} + R_{(v,a);jk}^{(2)}(t, r) \Psi_{2k,2} \Big\}, \\
j = \overline{1, n+1},
\end{aligned} \tag{3.433}$$

а матриці функції Гріна впливу системи інтерфейсних умов

$$\begin{aligned}
R_{(v,a);jk}^{(1)}(t, r) = & -d_k \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2}} \left[\left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,a);k+1}(r, \beta) \Big|_{r=R_k} \right] \times \\
& \times V_{(v,a);j}(r, \beta) \Omega_{(v,a)}(\beta) d\beta; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{1, n+1}.
\end{aligned} \tag{3.434}$$

$$R_{(v,a);jk}^{(2)}(t,r) = -d_k \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma_{n+1}^2}} \left[\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right] V_{(v,a);k+1}(r,\beta) \Big|_{r=R_k} \times \\ \times V_{(v,a);j}(r,\beta) \Omega_{(v,a)}(\beta) d\beta; \quad k = \overline{1,n}; \quad j = \overline{1,n+1}..$$

3.9, Гібридні інтегральні перетворення типу Вебера для необмежених однорідних циліндричних середовищ із симетричною порожниною

Розглядається методологія побудови скінченного інтегрального перетворення типу Вебера для однорідного обмеженого циліндричного середовища $I_0^+ = \{r : r \in (R_0, \infty), R_0 > 0\}$, породженого диференціальним оператором оператором Бесселя $B_{v,\alpha}$ і крайовими диференціальними операторами

$$L_{11}^m = \left(\alpha_{11}^1 + \delta_{11}^1 \frac{\partial^m}{\partial t^m} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^1 + \gamma_{11}^1 \frac{\partial^m}{\partial t^m}, m = \overline{1,2}, \quad |\alpha_{11}^1| + |\beta_{11}^1| \neq 0$$

для квазістатичних задач ($m=1$) і динамічних задач ($m=2$), що описує нестационарні режими масообміну на крайовій поверхні $r = R_0$. Наявність похідної

$\frac{\partial}{\partial t}$ в крайовому операторі L_1 приводить до появи спектрального параметра в крайовій умові відповідної сингулярної спектральної задачі Штурма-Ліувілля.

Інтегральне перетворення типу Вебера, яке б відображало цей чинник, побудуємо методом дельта-подібної послідовності, за яку візьмемо ядро Коші – фундаментальний розв'язок задачі Коші для відповідної параболічної задачі масопереносу. Розглянемо задачу побудови обмеженої області $D^+ = \{(t,r) : t > 0, r \in (R_0, \infty); R_0 > 0\}$ розв'язку рівняння масопереносу B -параболічного типу [23]

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - D_r B_{v,\alpha}[u] = 0, \gamma^2 \geq 0, D_r > 0, r \in (R_0, \infty) \quad (3.435)$$

за початковою умовою

$$u(t,r) \Big|_{t=0} = g(r), r \in (R_0, \infty) \quad (3.436)$$

та крайовими умовами

$$\left[(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u \Big|_{r=R_0} = 0; \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=\infty} = 0. \quad (3.437)$$

Тут вважається, що $|\alpha_{11}^0| + |\beta_{11}^0| \neq 0, \delta_{11}^0 \geq 0, \gamma_{11}^0 \geq 0, \alpha_{11}^0 \equiv \delta_{11}^0 g'(R_0) + \gamma_{11}^0 g(R_0) = 0$

В припущенні, що шукана функція $u(t,r)$ є оригіналом за Лапласом щодо змінної t [15], у зображенні за Лапласом розглядаємо крайову задачу:

побудувати обмежений на I_0^+ розв'язок диференціального рівняння Бесселя 2-го порядку для модифікованих функцій

$$(B_{v,\alpha} - q^2)u^*(p, r) = -\bar{g}(r); \bar{g} = D^{-1}g(r); q = D^{-1/2}(p + \gamma^2)^{1/2} \quad (3.438)$$

за крайовими умовами

$$(\bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{11}^0)u^*(p, r) \Big|_{r=R_0} = 0, \frac{du^*}{dr} \Big|_{r=\infty} = 0 \quad ; \quad (3.439)$$

$$\bar{\alpha}_{11}^0 = \alpha_{11}^0 + p\delta_{11}^0, \bar{\beta}_{11}^0 = \beta_{11}^0 + p\gamma_{11}^0, p = \sigma + i\tau, i^2 = -1$$

Зафіксуємо ту вітку q , на якій $Re\ q > 0$. Безпосередньо перевіряється, що розв'язком сингулярної крайової задачі (3.238), (3.239) є функція

$$u^*(p, r) = \int_{R_0}^{\infty} H_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) \bar{g}(\rho) \rho^{2\alpha+1} d\rho. \quad (3.440)$$

Тут бере участь функція Коші

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho) = -\frac{q^{2\alpha}}{U_{v,\varepsilon 11}^{02}(qR_0)} \begin{cases} K_{v,\alpha}(q\rho) \cdot \Phi_{v\alpha 11}^{0*}(qR_0, qr); R_0 < r < \rho < \infty \\ K_{v,\alpha}(qr) \cdot \Phi_{v\alpha 11}^{0*}(qR_0, q\rho); R_0 < \rho < r < \infty \end{cases}. \quad (3.441)$$

Особливими точками функції Коші $\mathcal{H}_{v,\alpha}^*(p, r, \rho)$ є точки галуження $p = -\gamma^2$ та $p = \infty$. Внаслідок леми Жордана й теореми Коші отримуємо формулу повернення до оригіналу:

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}(p, r, \rho) = -\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Im}\{H_{v,\alpha}^*(e^{\pi i}(\beta^2 + \gamma^2), r, \rho)\} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} \beta d\beta. \quad (3.442)$$

Тут $\sqrt{p + \gamma^2} = i\beta$, $p = -(\beta^2 + \gamma^2)$ або $p = (\beta^2 + \gamma^2)\exp \pi i$ та $dp = -2\beta d\beta$;

$$q = \frac{i\beta}{D_r^{1/2}} \equiv i \cdot b(\beta) = e^{\pi i/2} b(\beta).$$

Враховуючи співвідношення

$$U_{v,\alpha 11}^{01}(e^{\pi i/2} b(\beta) R_0) = \exp\left[(v - \alpha) \frac{\pi i}{2}\right] u_{v,\alpha 11}^{01}(\beta R_0),$$

$$U_{v,\alpha 11}^{02}(e^{\pi i/2} b(\beta) R_0) = -\frac{\pi}{2} i \exp\left[-(v - \alpha) \frac{\pi i}{2}\right] (u_{v,\alpha 11}^{01}(bR_0) - i u_{v,\alpha 11}^{02}(bR_0)),$$

$$\Phi_{v,\alpha 11}^{0*}(ibR_0, ibr) = -\frac{\pi}{2} e^{-\pi i \alpha} \Phi_{v,\alpha 11}^0(bR_0, br) \equiv -\frac{\pi}{2} e^{-\pi i \alpha} V_{v,\alpha}(r, \beta),$$

згідно з формулою (3.442) одержуємо

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}(p, r, \rho) = \int_0^{\infty} e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} V_{v,\alpha}(r, \beta) V_{v,\alpha}(\rho, \beta) \Omega_{v,\alpha}(\beta) d\beta q \sigma, \sigma = D_r^{-1}. \quad (3.443)$$

У формулі (3.243) бере участь спектральна частина

$$\Omega_{v,\alpha}(\beta) = \beta[b(\beta)]^{2\alpha} ([u_{v,\alpha_{11}}^{01}(bR_0)]^2 + [u_{v,\alpha_{11}}^{02}(bR_0)]^2)^{-1} \quad (3.444)$$

Повертаючись у формулі (3.440) до оригіналу, маємо єдиний розв'язок параболічної задачі (3.435) — (3.437):

$$u(t, r) = \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} V_{v,\alpha}(r, \beta) \Omega_{v,\alpha}(\beta) d\beta \int_{R_0}^\infty g(\rho) V_{v,\alpha}(\rho, \beta) \rho^{2\alpha+1} \sigma d\rho d\beta. \quad (3.445)$$

Внаслідок початкової умови (3.236) одержуємо інтегральне зображення:

$$g(r) = \int_0^\infty V_{v,\alpha}(\rho, \beta) \Omega_{v,\alpha}(\beta) d\beta \int_{R_0}^\infty g(\rho) V_{v,\alpha}(\rho, \beta) \rho^{2\alpha+1} \sigma d\rho. \quad (3.446)$$

На основі властивостей ядра $H_{v,\alpha}(t, r, \rho)$ як дельта-подібної по t послідовності маємо твердження .

Теорема 3.9.1 (про інтегральне зображення). Якщо функція $f(r) = r^{\alpha+1/2} g(r)$ визначена, неперервна, абсолютно сумовна й має обмежену варіацію на множині $[R_0, \infty]$, то для будь-якого $r \in I^+$ справджується інтегральне зображення (3.446).

Доведення: доведення теореми здійснюється за схемою доведення теореми Т.3.5.1.

Зауваження : Якщо функція $g(r)$ кусково-неперервна, то в рівності (3.246) треба $g(r)$ замінити на $\frac{1}{2}[g(r-0) + g(r+0)]$.

Інтегральне зображення (3.446) породжує пряме $H_{v,\alpha}$ й обернене $H_{v,\alpha}^{-1}$ інтегральне перетворення типу Вебера із спектральним параметром:

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}[g(r)] = \int_{R_0}^\infty g(r) V_{v,\alpha}(r, \beta) \sigma r^{2\alpha+1} dr \equiv \tilde{g}(\beta), \quad (3.447)$$

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}^{-1}[\tilde{g}(r)] = \int_{R_0}^\infty \tilde{g}(r) V_{v,\alpha}(r, \beta) \Omega_{v,\alpha}(\beta) d\beta \equiv g(\beta). \quad (3.448)$$

Теорема 3.9.2 (про основну тотожність) Якщо функція $f(r) = B_{v,\alpha}[g(r)]$ неперервно диференційована на множині I^+ і виконуються граничні рівності

$$\lim_{r \rightarrow R_0} [(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^0) f(r)] = f_0 \equiv \text{const}, \delta_{11}^0 g'(R_0) + \gamma_{11}^0 g(R_0) = 0 \quad (3.449)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{2\alpha+1} (g'(r) V_{v,\alpha}(r, \beta)) = 0 \quad (3.250)$$

то справджується основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора $M_{v,\alpha}$:

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}[M_{v,\alpha}[g(r)]] = -\beta^2 \tilde{g}(\beta) + \frac{2}{\pi} b^{-2\alpha} f_0 \quad (3.451)$$

Доведення: Внаслідок функціонального співвідношення [10]

$$J_{v+1}(x)N_v(x) - J_v(x)N_{v+1}(x) = \frac{2}{\pi} \frac{1}{x}$$

знаходимо, що $V_{v,\alpha}(r, \beta) \Big|_{r=R_0} = -\frac{2}{\pi} \tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{R_0^{-(2\alpha+1)}}{b^{2\alpha}}, \frac{d}{dr} V_{v,\alpha} \Big|_{r=R_0} = \frac{2}{\pi} \tilde{\beta}_{11}^0 \frac{R_0^{-(2\alpha+1)}}{b^{2\alpha}}.$ Звідси

випливає, що спектральна функція $V_{v,\alpha}(r, \beta)$ задовольняє тотожність

$$(\tilde{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{11}^0) V_{v,\alpha}(r, \beta) \Big|_{r=R_0} = 0 \quad (3.452)$$

або внаслідок того, що $(a^2 B_{v,\alpha} - \gamma^2) V_{v,\alpha}(r, \beta) \equiv -(\beta^2 + \gamma^2) V_{v,\alpha}(r, \beta)$, тотожність

$$[\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 (a^2 B_{v,\alpha} - \gamma^2) \frac{d}{dr} + \gamma_{11}^0 (a^2 B_{v,\alpha} - \gamma^2) + \beta_{11}^0] V_{v,\alpha}(r, \beta) \Big|_{r=R_0} = 0. \quad (3.453)$$

Проінтегруємо в лівій частині рівності (3.451) два рази частинами:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{v,\alpha}[M_{v,\alpha}[g(r)]] &= \int_{R_0}^{\infty} a^2 B_{v,\alpha}[g(r)] V_{v,\alpha}(r, \beta) r^{2\alpha+1} \sigma dr = \\ &= -\beta^2 \tilde{g}(\beta) + 2r^{2\alpha+1} g'(r) V_{v,\alpha}(r, \beta) - g(r) V'_{v,\alpha}(r, \beta) \Big|_{R_0}^{\infty} = \\ &= -\beta^2 \tilde{g}(\beta) + R_0^{2\alpha+1} \frac{f_0}{\tilde{\alpha}_0} V_{v,\alpha}(R_0, \beta) = -\beta^2 \tilde{g}(\beta) + \frac{2}{\pi} b^{-2\alpha} f_0. \end{aligned}$$

Позаінтегральний член в точці $r=\infty$ перетворюється в нуль в силу граничної рівності (3.450). Теорема доведена.

Логічна схема застосування отриманого інтегрального перетворення до математичних моделей масопереносу показана нижче.

Квазістатична модель: побудувати обмежений в області D^+ розв'язок рівняння масопереносу для необмеженого по радіальній координаті r циліндричного середовища із симетричною порожниною для нестационарного режиму масообміну на поверхні $r=R_0$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + \gamma^2 T - a^2 B_{v,\alpha}[T] = f(t, r) \quad (3.454)$$

за початковою умовою

$$T \Big|_{t=0} = g(r), a_{11}^0 \equiv \delta_{11}^0 g'(R_0) + \gamma_{11}^0 g(R_0) = 0 \quad (3.455)$$

та крайовими умовами

$$[(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t}] T \Big|_{r=R_0} = \omega(t), \frac{\partial T}{\partial r} \Big|_{r=\infty} = 0. \quad (3.456)$$

У результаті застосування до задачі (3.454) – (3.456) інтегрального оператора $\mathcal{H}_{v,\alpha}$ за правилом (3.457) внаслідок тотожності (3.451) одержуємо задачу Коші:

$$[\frac{d}{dt} + (\beta^2 + \gamma^2)] \tilde{T}(t, \beta) = \tilde{f}(t, \beta) + \frac{2}{\pi} b^{-2\alpha} \omega(t); \tilde{T} \Big|_{t=0} = \tilde{g}(\beta) \quad (3.457)$$

Розв'язком задачі Коші (3.457) є функція

$$\tilde{T}(t, \beta) = \frac{2a^{2\alpha}}{\pi\beta^{2\alpha}} \int_0^t e^{-(\beta^2 + \gamma^2)(t-\tau)} \omega(\tau) d\tau + \int_0^t e^{-(\beta^2 + \gamma^2)(t-\tau)} [\tilde{f}(\tau, \beta) + \delta_+(\tau) \tilde{g}(\beta)] d\tau \quad (3.458)$$

Визначимо функцію Коші

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}(t, r, \rho) = \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} V_{v,\alpha}(r, \beta) \Omega_{v,\alpha}(\beta) d\beta, \quad (3.459)$$

породжену неоднорідністю рівняння (початкової умови), та функцією Гріна

$$W_{v,\alpha}(t, r) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-(\beta^2 + \gamma^2)t} V_{v,\alpha}(r, \beta) \Omega_{v,\alpha}(\beta) a^{2\alpha} \beta^{-2\alpha} d\beta, \quad (3.460)$$

породжену режимом масообміном на межі $r = R_0$.

Застосувавши до функції $\tilde{T}(t, \beta)$, визначеної формулою (3.458), інтегральний оператор $\mathcal{H}_{v,\alpha}^{-1}$ за правилом (3.448), одержуємо функцію

$$T(t, r) = \int_0^t W_{v,\alpha}(t - \tau r) \omega(\tau) d\tau + \int_0^t \int_{R_0}^\infty H_{v,\alpha}(t - \tau, r, \rho) [f(\tau, \rho) + \delta_+(\tau) g(\rho)] \rho^{2\alpha+1} \sigma d\rho + W_{v,\alpha}(t, r) a_{11}^0, \quad (3.461)$$

яка є шуканим розв'язком задачі (3.454) – (3.456).

Динамічна модель: побудувати обмежений в області D^+ розв'язок рівняння масопереносу гіперболічного типу для необмеженого середовища з вісесиметричною порожниною з нестационарним режимом масообміну на поверхні $r = R_0$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial t^2} + \gamma^2 - a^2 B_{v,\alpha}\right) u(t, r) = f(t, r) \quad (3.462)$$

за початковими умовами

$$u|_{t=0} = g_1(r), \quad \frac{\partial u}{\partial t}|_{t=0} = g_2(r) \quad (3.463)$$

за крайовими умовами

$$[(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial^2}{\partial t^2}) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial^2}{\partial t^2}] u|_{r=R_0} = \omega(t), \quad (3.464)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r^{2\alpha+1} \left(\frac{\partial u}{\partial r} V_{v,\alpha}(r, \beta) - u(t, r) \frac{\partial}{\partial r} V_{v,\alpha}(r, \beta) \right) = 0. \quad (3.465)$$

Ми вважаємо що $a_m^0 \equiv \delta_{11}^0 g'_m(R_0) + \gamma_{11}^0 g_m(R_0) = 0$, $m = 1, 2$ інтегральний оператор $\mathcal{H}_{v,\alpha}$ за правилом (3.447), внаслідок тотожності (3.451) отримуємо задачу Коші:

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \beta^2 + \gamma^2\right) \tilde{u}(t, \beta) = \tilde{f}(t, \beta) + \frac{2a^{2\alpha}}{\pi\beta^{2\alpha}} \omega(t), \quad \tilde{u}(t, \beta)|_{t=0} = \tilde{g}_1(\beta), \quad \frac{d\tilde{u}}{dt}|_{t=0} = \tilde{g}_2(\beta). \quad (3.466)$$

Безпосередньо перевіряється, що розв'язком задачі Коші (3.466) є функція

$$\tilde{u}(t, \beta) = \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}} \tilde{g}_2(\beta) + \frac{d}{dt} \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}} \tilde{g}_1(\beta) + \int_0^t \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma^2} (t - \tau)}{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}} [\tilde{f}(\tau, \beta) + \frac{2}{\pi} \frac{a^{2\alpha}}{\beta^{2\alpha}} \omega(\tau)] d\tau. \quad (3.467)$$

Визначимо функцію Коші

$$\mathcal{H}_{v,\alpha}(t, r, \rho) = \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}} V_{v,\alpha}(r, \beta) \Omega_{v,\alpha}(\beta) d\beta, \quad (3.468)$$

породжену наявністю збурюючої сили (збуреного початкового стану), та функцію Гріна

$$G_{v,\alpha}(t, r) = \int_0^\infty \frac{\sin \sqrt{\beta^2 + \gamma^2} t}{\sqrt{\beta^2 + \gamma^2}} \frac{2}{\pi} \frac{a^{2\alpha}}{\beta^{2\alpha}} V_{2\alpha}(r, \beta) \Omega_{2\alpha}(\beta) d\beta, \quad (3.469)$$

породжену законом масообміну на межі $r = R_0$.

У результаті застосування до функції $\tilde{u}(t, \beta)$, визначеної формулою (3.467), інтегрального оператора $\mathcal{H}_{v,\alpha}^{-1}$ за правилом (3.448) одержуємо функцію

$$u(t, r) = \int_0^t G_{v,\alpha}(t - \tau, r) \omega(\tau) d\tau + \int_0^t \int_{R_0}^\infty H_{v,\alpha}(t - \tau, \rho) [f(\tau, \rho) + \delta_+(\tau) g_2(\rho)] \sigma \rho^{2\alpha+1} d\rho d\tau + \quad (3.470)$$

$$+ \frac{\partial}{\partial t} \int_{R_0}^\infty H_{v,\alpha}(t, r, \rho) g_1(\rho) \sigma \rho^{2\alpha+1} d\rho + \frac{\partial^2}{\partial t^2} G_{v,\alpha}(t, r) a_1^0 + G_{v,\alpha}(t, r) a_2^0,$$

яка повністю визначає єдиний розв'язок гіперболічної задачі (3.462) – (3.465). Зауважимо, що при $\delta_{11}^0 = 0, \gamma_{11}^0$ отримаємо відомий в математичній літературі розв'язок гіперболічної задачі масопереносу.

3.10. Моделювання систем масопереносу в багатовимірному і неоднорідному по декількох напрямках середовищі

Розглядається масоперенос, що протікає в багатовимірному неоднорідному по декількох напрямках середовищі (рис. 3.1).

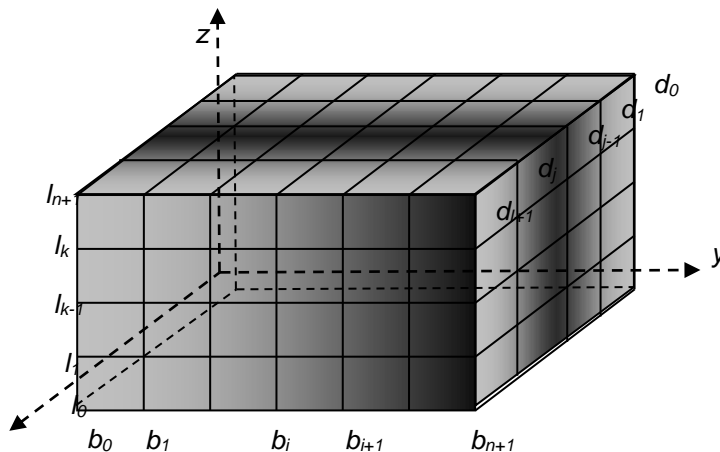


Рисунок. 3.1. Схематизація тривимірної неоднорідної області переносу

Крайову задачу для системи такого неоднорідного переносу можна описати на прикладі двовимірного неоднорідного по двох координатах середовища як побудову в області $\mathcal{D}_{m,n} = \left\{ (t, x, z) : t > 0; x \in \bigcup_{i=1}^{m+1} (d_{i-1}, d_i), d_0 \geq 0, d_{m+1} = \infty; z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k), l_0 > 0, l_{n+1} < \infty \right\}$ обмеженого розв'язку системи диференціальних рівнянь в частинних похідних 2-го порядку параболічного типу, що описує дифузійний масоперенос (молекулярний транспорт) в $(m+1) \times (n+1)$ -складовому неоднорідному середовищі з врахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів (концентрацій) переносу на масообмінних поверхнях $x = d_i, z = l_k; i = \overline{0, m}; k = \overline{0, n+1}$ [14]

$$\frac{\partial u_{ki}}{\partial t} + \chi_{ki}^2 u_{ki} = D_{x_i} \frac{\partial^2 u_{ki}}{\partial x^2} + D_{z_k} \frac{\partial^2 u_{ki}}{\partial z^2} (t, x, z) + S_{ki}(t, x, z), \quad x \in (d_{i-1}, d_i), i = \overline{1, m+1}; \quad (3.471)$$

$$z \in (l_{k-1}, l_k), k = \overline{1, n+1}$$

за початковими та крайовими умовами

$$u_{ki}(t, x, z)|_{t=0} = g_{ki}(x, z), \quad (3.472)$$

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{i1}(t, x, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_{0i}(t, x), \quad \left[\left(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{n+1,i}(t, x, z) \Big|_{z=l_{n+1}} = \omega_{n+1,i}(t, x),$$

$$\left[\left(\alpha_{x22}^{m+1} + \delta_{x22}^{m+1} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{x22}^{m+1} + \gamma_{x22}^{m+1} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k,1}(t, x, z) \Big|_{x=0} = \omega_{k,0}(t, z); \quad \frac{\partial}{\partial x} u_{k,m+1}(t, x, z) \Big|_{x=\infty} = 0 \quad (3.473)$$

та системою $n \times m$ -інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^{ki} + \delta_{j1}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^{ki} + \gamma_{j1}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1,i}(t, x, z) - \left[\left(\alpha_{j2}^{ki} + \delta_{j2}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^{ki} + \gamma_{j2}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1,i}(t, x, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = \omega_{ki}^j(t, x),$$

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{xj1}^{ki} + \delta_{xj1}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{xj1}^{ki} + \gamma_{xj1}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k,i}(t, x, z) - \left[\left(\alpha_{xj2}^{ki} + \delta_{xj2}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial x} + \beta_{xj2}^{ki} + \gamma_{xj2}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k,i+1}(t, x, z) \right\} \Big|_{x=d_i} = \nu_{ki}^j(t, z)$$

$$j = \overline{1, 2}; k = \overline{1, n}; i = \overline{1, m}$$

$$(3.474)$$

Схема алгоритму побудови аналітичного розв'язку. В результаті застосування до вихідної крайової задачі (3.1)-(3.4) в комбінації інтегральних перетворень Фур'є для неоднорідних обмежених і напівобмежених середовищ перетворень Фур'є по різних геометричних напрямках, математичне обґрунтування запровадження яких подано в п. 2.7 і Додатку А, визначеними гібридними інтегральними матричними операторами [11, 14]

$$F_n[...]=\left[\int_{l_0}^{l_1}...V_1(z,\beta_{m_1})\sigma_1dz\int_{l_1}^{l_2}...V_2(z,\beta_{m_1})\sigma_2dz...\int_{l_{n-1}}^{l_n}...V_n(z,\beta_{m_1})\sigma_ndz\int_{l_n}^{l_{n+1}}...V_{n+1}(z,\beta_{m_1})\sigma_{n+1}dz\right],$$

$$F_{+,n}...=[\int_{l_0}^{l_1}...V_{x_1}(x,\eta)\sigma_1dz\int_{l_1}^{l_2}...V_{x_1}(x,\eta)\sigma_2dz...\int_{l_{n-1}}^{l_n}...V_{x_1}(x,\eta)\sigma_ndz\int_{l_n}^{\infty}...V_{x_{n+1}}(x,\eta)\sigma_{n+1}dx]$$

$$F_n^{-1}[...]=\left[\begin{array}{c} \sum_{m_1=1}^{\infty}...V_1(z,\beta_{m_1})\left(\|V(z,\beta_{m_1})\|_1\right)^{-1} \\ \sum_{m_1=1}^{\infty}...V_2(z,\beta_{m_1})\left(\|V(z,\beta_{m_1})\|_1\right)^{-1} \\ \\ \sum_{m_1=1}^{\infty}...V_{n+1}(z,\beta_{m_1})\left(\|V(z,\beta_{m_1})\|_1\right)^{-1} \end{array}\right], \quad F_+^{-1}[...]=\left[\begin{array}{c} \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}...V_{x_1}(x,\eta)\Omega_m(\eta)d\eta \\ \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}...V_{x_2}(x,\eta)\Omega_m(\eta)d\eta \\ \\ \frac{2}{\pi}\int_0^{\infty}...V_{x_{n+1}}(x,\eta)\Omega_m(\eta)d\eta \end{array}\right],$$

Отримуємо згідно [11] єдиний розв'язок (3.1)-(3.4), що описує просторово-розподілене поле концентрацій в багатоконпонентному $(m+1) \times (n+1)$ -складовому неоднорідному середовищі

$$\begin{aligned}
u_{ki}(t, x, z) = & \sum_{k_1=1}^{n+1} \sum_{i_1=1}^{m+1} \int_0^t \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \int_{d_{i_1-1}}^{d_{i_1}} \mathcal{H}_{k, k_1, i, i_1}(t-\tau; x, \zeta; z, \xi) \left[S_{k_1, i_1}(\tau, \zeta, \xi) - g_{k_1, i_1}(\zeta, \xi) \delta_+(\tau) \right] \sigma_{x_{i_1}} d\zeta \sigma_{k_1} d\xi d\tau + \\
& + \int_0^t \sum_{i_1=1}^{m+1} \int_{d_{i_1-1}}^{d_{i_1}} \left[\mathcal{W}_{0, k, i, i_1}(t-\tau; x, \zeta; z, l_{k_1}) \omega_{0i_1}(\tau, \zeta) + \mathcal{W}_{n+1, k, i, i_1}(t-\tau; x, \zeta; z) \omega_{n+1, i_1}(\tau, \zeta) \right] \sigma_{x_{i_1}} d\zeta d\tau + \\
& + \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \mathcal{V}_{0, i, k, k_1}(t-\tau; x, d_{i_1}; z, \xi) \omega_{k_1, 0}(\tau, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau + \\
& + \int_0^t \sum_{k_1=1}^n \sum_{i_1=1}^{m+1} \int_{d_{i_1-1}}^{d_{i_1}} \left[\mathcal{R}_{k, k_1, i, i_1}^{11}(t-\tau; x, \zeta; z, l_{k_1}) \omega_{k, i_1}^1(\tau, \zeta) - \mathcal{R}_{k, k_1, i, i_1}^{12}(t-\tau; x, \zeta; z, l_{k_1}) \omega_{k, i_1}^2(\tau, \zeta) \right] \sigma_{x_{i_1}} d\zeta d\tau + \\
& + \int_0^t \sum_{i_1=1}^m \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \left[\mathcal{R}_{k, k_1, i, i_1}^{21}(t-\tau; x, d_{i_1}; z, \xi) \upsilon_{k_1, i}^1(\tau, \xi) - \mathcal{R}_{k, k_1, i, i_1}^{22}(t-\tau; x, d_{i_1}; z, \xi) \upsilon_{k_1, i}^2(\tau, \xi) \right] \sigma_{k_1} d\xi d\tau; \\
k = \overline{1, n+1}; i = \overline{1, m+1}
\end{aligned}
\tag{3.475}$$

 T_{yT}

- фундаментальні матриці Коші впливу неоднорідностей системи

$$\mathcal{H}_{k,k_1,i,i_1}(t;\zeta,x;z,\xi)=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty\sum_{m_1=1}^\infty e^{-\left(\beta_{m_1}^2+\eta^2+\chi_{n+1,m+1}^2\right)t}\frac{V_k\left(z,\beta_{m_1}\right)V_{k_1}\left(\xi,\beta_{m_1}\right)V_{x_i}\left(x,\eta\right)V_{x_{i_1}}\left(\zeta,\eta\right)\Omega_m(\eta)d\eta}{\left\|V\left(z,\beta_{m_1}\right)\right\|_1^2}$$

- матриці Гріна впливу крайових умов

$$\mathcal{W}_{0_{k,i,i_1}}(t;\zeta,x;l_0,z)=-D_1\sigma_1\sum_{m_1=1}^{\infty}\int_0^{\infty}e^{-(\beta_{m_1}^2+\eta^2+\chi_{n+1,m+1}^2)t}\frac{V_1(l_0,\beta_{m_1})V_k(z,\beta_{m_1})V_{x_i}(x,\eta)V_{x_{i_1}}(\zeta,\eta)\Omega_m(\eta)d\eta}{\left[\alpha_{11}^0-\sigma_{11}^0(\beta_{m_1}^2+\chi_{n+1}^2)\right]\|V(z,\beta_{m_1})\|_1^2};$$

$$\mathcal{W}_{n+1_{k,i,i_1}}(t;\zeta,x;l,z)=\frac{2}{\pi}\sum_{m_1=1}^{\infty}\int_0^{\infty}e^{-(\beta_{m_1}^2+\eta^2+\chi_{n+1,m+1}^2)t}\frac{V_k(z,\beta_{m_1})V_{n+1}(l,\beta_{m_1})V_{x_i}(x,\eta)V_{x_{i_1}}(\zeta,\eta)\Omega_m(\eta)d\eta}{(\beta_{m_1}^2+\chi_{n+1}^2)\|V(z,\beta_{m_1})\|_1^2};k=1,\overline{n+1}$$

$$\mathcal{V}_{0_{i,k,k_1}}(t;0,x;\xi,z)=-D_{x_{+1}}\sigma_{x_1}\frac{2}{\pi}\sum_{m_1=1}^{\infty}\int_0^{\infty}e^{-(\beta_{m_1}^2+\eta^2+\chi_{n+1,m+1}^2)t}\cdot\frac{V_{x_i}(x,\eta)V_{x_{i_1}}(0,\eta)\Omega_m(\eta)d\eta V_k(z,\beta_{m_1})V_{k_1}(\xi,\beta_{m_1})}{\left[\alpha_{x11}^0-\sigma_{x11}^0(\eta^2+\chi_{n+1}^2)\right]\|V(z,\beta_{m_1})\|_1^2};$$

- матриці Гріна, породжені системою $n \times m$ - інтерфейсних взаємодій

$$\mathcal{R}_{k,k_1,i,i_1}^{1s}(t;x,\zeta;l_{k_1},z)=$$

$$\frac{D_{k_1}\sigma_{k_1}}{c_{11,k_1}}\frac{2}{\pi}\sum_{m_1=1}^{\infty}\int_0^{\infty}e^{-(\beta_{m_1}^2+\eta^2+\chi_{n+1,m+1}^2)t}\frac{\tilde{\alpha}_{s2}^{k_1i_1}V'_{k_1+1}(l_{k_1},\beta_{m_1})+\tilde{\beta}_{s2}^{k_1i_1}V_{k_1+1}(l_{k_1},\beta_{m_1})}{\|V(z,\beta_{m_1})\|_1^2}V_k(z,\beta_{m_1})\cdot V_{x_i}(x,\eta)V_{x_{i_1}}(\zeta,\eta)\Omega_m(\eta)d\eta$$

$$\mathcal{R}_{k,k_1,i,i_1}^{2s}(t;x,d_{i_1};\xi,z)=$$

$$\frac{D_{x_{i_1}}\sigma_{x_{i_1}}}{c_{x11,i_1}}\frac{2}{\pi}\sum_{m_1=1}^{\infty}\int_0^{\infty}e^{-(\beta_{m_1}^2+\eta^2+\chi_{n+1,m+1}^2)t}\left(\tilde{\alpha}_{s2}^{k_1i_1}V'_{x_{i_1}+1}(d_{i_1},\eta)+\tilde{\beta}_{s2}^{k_1i_1}V_{x_{i_1}+1}(d_{i_1},\eta)\right)V_{x_i}(x,\eta)\Omega_m(\eta)d\eta\frac{V_{k_1}(\xi,\beta_{m_1})V_k(z,\beta_{m_1})}{\|V(z,\beta_{m_1})\|_1^2},$$

$$s=\overline{1,2}.$$

Слідуючи [3, 31], виписавши постановки прямих задач ідентифікації причинних характеристик задачі, зроблено узальнення та отримані з використанням побудованих функцій впливу аналітичні вирази градієнтів функціоналів-нев'язки для ідентифікації відповідних умов крайової задачі у багатовимірній постановці [14].

3.11. Моделювання неоднорідних В-параболічних задач масопереносу з узагальненими крайовими та інтерфейсними умовами для циліндричних багатокомпонентних середовищ

Розглядається початково-крайова задача переносу побудови обмеженого розв'язку системи В-параболічних рівнянь масопереносу для обмеженого (по радіальній координаті r) n -компонентного циліндричного середовища

$D_n^+ = \left\{ (t, r) : t \in (0; \infty), r \in I_n = \bigcup_{m=1}^{n+1} (R_{m-1}, R_m); R_0 = 0, R_{n+1} \equiv R < \infty \right\}$ з врахуванням швидкостей зміни

градієнтів концентрацій на масообмінних поверхнях $r = R_m, j = \overline{1, m}$ [11, 28]

$$\frac{\partial u_m}{\partial t} + \gamma_m^2 u_m - D_m B_{\gamma_m, \alpha_m} [u_m] = f_m(t, r), r \in (R_{m-1}, R_m) \quad (3.476)$$

за початковими умовами

$$u_m(t, r)|_{t=0} = g_m(r), r \in (R_{m-1}, R_m); m = \overline{1, n+1}, R_0 = 0 \quad (3.477)$$

крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow R_0} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^{\alpha_0 - \nu_0} U_1(t, r) \right] = 0; [(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1}) \frac{\partial}{\partial t} + (\beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1}) \frac{\partial}{\partial r}] U_{n+1}(t, r)|_{r=R_{n+1}} = \omega_{n+1}(t) \quad (3.478)$$

та системою n - інтерфейсних умов по координаті r

$$\left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha_{j1}^k + \frac{\partial}{\partial t} \delta_{j1}^k \right) + \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{j1}^k \right] U_k(t, r)|_{r=R_k} - \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha_{j2}^k + \frac{\partial}{\partial t} \delta_{j2}^k \right) + \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{j2}^k \right] U_{k+1}(t, r)|_{r=R_k} = \omega_{jk}(t); j = 1, 2; k = \overline{1, n} \quad (3.479)$$

Побудову аналітичного розв'язку продемонструємо на логічній схемі застосування запровадженого скінченного інтегрального перетворення типу Ганкеля 1 – го роду із спектральним параметром [11]. Поклавши $k_m^2 = \gamma_1^2 - \gamma_m^2 \geq 0, m = \overline{1, n+1}$, де $\max \{ \gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_n^2; \gamma_{n+1}^2 \} = \gamma_1^2$ та ввівши до розгляду функції

$$u(t, r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \Theta(R_m - r) u_m(t, r), \quad g(r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \Theta(R_m - r) q_m(r);$$

$$f(t, r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \Theta(R_m - r) f_m(t, r); \quad \gamma^2 = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \Theta(R_m - r) \gamma_m^2,$$

система (3.6) і початкові умови (3.7) набувають вигляду задачі Коші

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - B_{(\nu, \alpha)}[u] = f(t, r); \quad u|_{t=0} = g(r). \quad (3.480)$$

Застосувавши до задачі (3.10) інтегральний оператор $\mathcal{H}_{(\nu, \alpha); n}$, визначений формулою (3.39), внаслідок тотожності (3.43) одержуємо задачу Коші

$$\left(\frac{d}{dt} + \beta_j^2 + \gamma_1^2 \right) u_j(t) \mathcal{F}_j(t), \quad u_j(t)|_{t=0} = g_j, \quad (3.481)$$

розв'язком якої є функція

$$u_j(t) = e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} g_j + \int_0^t e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)(t-\tau)} \mathcal{F}_j(\tau) d\tau \equiv \int_0^t e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)(t-\tau)} [\mathcal{F}_j(\tau) + g_j \delta_+(\tau)] d\tau.$$

Тут

$$\begin{aligned}
\mathcal{F}_j(t) = & f_j(t) + R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} \left(\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1} \right)^{-1} (\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \\
& + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j)) (\omega_{n+1}(t) + \Psi_{n+1} \delta_+(t)) + \\
& + \sum_{k=1}^n \frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \right]_{r=R_k} (\omega_{2k}(t) + \Psi_{2k} \delta_+(t)) - \\
& - \left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} (\omega_{1k}(t) + \Psi_{1k} \delta_+(t)); \\
\Psi_{n+1} = & \delta_{22}^{n+1} g'_{n+1}(R_{n+1}) + \gamma_{22}^{n+1} g_{n+1}(R_{n+1}); \Psi_{jk} = \delta_{j1}^k g'_k(R_k) + \gamma_{j1}^k q_k(R_k) - \delta_{j2}^k g'_{k+1}(R_k) - \gamma_{j2}^k g_{k+1}(R_k); j=1, 2, k=\overline{1, n}.
\end{aligned}$$

В результаті застосування до $u_j(t)$ інтегрального оператора $\mathcal{H}_{(v,\alpha);n}^{-1}$ зворотної дії, визначеного за правилом [11] після низки перетворень одержуємо компоненти

$$\begin{aligned}
u_i(t, r) = & \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^t \int_{R_{k-1}}^{R_k} \mathcal{H}_{(v,\alpha);jk}(t-\tau, r, \rho) [f_k(\tau, \rho) + g_k(\rho) \delta_+(\tau)] \sigma_k \rho^{2\alpha_k+1} d\rho d\tau + \\
& + \int_0^t W_{(v,\alpha);n+1,i}(t-\tau, r) [\omega_{n+1}(\tau) + \psi_{n+1} \delta_+(\tau)] d\tau + \sum_{k=1}^n \int_0^t [\mathcal{R}_{(v,\alpha);jk}^{(1)}(t-\tau, r) (\omega_{1k}(\tau) + \psi_{1k} \delta_+(\tau)) + \\
& + \mathcal{R}_{(v,\alpha);jk}^{(2)}(t-\tau, r) (\omega_{2k}(\tau) + \psi_{2k} \delta_+(\tau))] d\tau, i=\overline{1, n+1}.
\end{aligned} \tag{3.482}$$

які повністю описують єдиний розв'язок крайової B -параболічної задачі масопереносу (3.476) – (3.479), де її головними розв'язками є:

- матриця впливу, породжених неоднорідністю системи і початкових умов

$$\mathcal{H}_{(v,\alpha);jk}(t, r, \rho) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} \frac{V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha);k}(\rho, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2}; j, k = \overline{1, n+1}$$

- вектор функції Гріна, породжені впливом масообміну на крайовій поверхні $r = R_{n+1} \equiv R$

$$\begin{aligned}
W_{(v,\alpha);n+1,i}(t, r) = & \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} [R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} (\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1})^{-1} \times \\
& \times (\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j))] \frac{V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2}; i=\overline{1, n+1}
\end{aligned}$$

- матриці Гріна впливу системи n -інтерфейсних умов

$$\mathcal{R}_{(v,\alpha);jk}^{(s)}(t,r) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} \left[\tilde{\alpha}_{p2}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{p2}^k \right] V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) \left(\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_1^2 \right)^{-1},$$

$$s = \overline{1,2}, \quad p = \begin{cases} 2 & , s = 1 \\ 1 & , s = 2 \end{cases}, \quad i = \overline{1, n+1}.$$

3.12. Двовимірна циліндрична неоднорідна задача багатокomпонентних систем переносу

Розглядається масоперенос, що протікає в неоднорідну по декількох напрямках середовищах, зокрема осьовому і радіальному (рис. 3.2).

Крайову задачу в такому неоднорідному переносі можна описати як побудову в області

$$\mathcal{D}_{n,m} = \left\{ (t, r, z) : t > 0; r \in \bigcup_{i=1}^{m+1} (R_{i-1}, R_i), R_0 = 0, R_{m+1} < \infty; z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k), l_0 > 0, l_{n+1} < \infty \right\} \text{ обмеженого}$$

розв'язку системи диференціальних рівнянь в частинних похідних 2-го порядку параболічного типу, що описує дифузійний масоперенос (молекулярний транспорт) в обмеженому $(m+1) \times (n+1)$ -скадовому неоднорідному середовищі з врахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів (концентрацій) переносу на масообмінних поверхнях $r = R_i, z = l_k; i = \overline{0, m+1}; k = \overline{0, n+1}$ [11, 14]

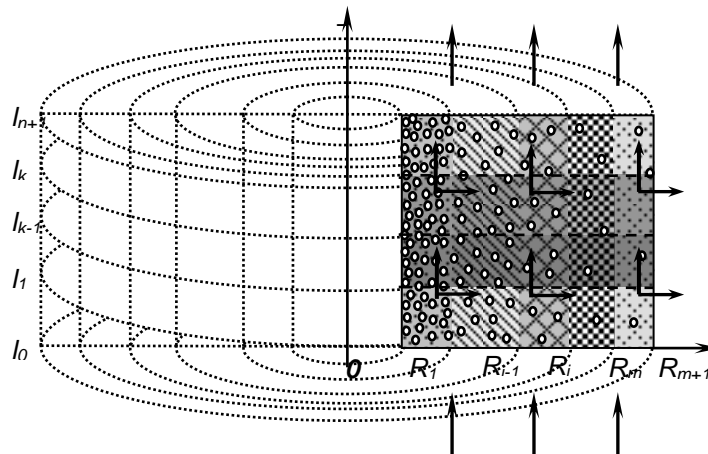


Рисунок 3.2. Схематизація багатомовимірних неоднорідних циліндричних областей переносу

$$\frac{\partial u_{ki}}{\partial t} + \chi_{ki}^2 u_{ki} = D_{z_k} \frac{\partial^2 u_{ki}}{\partial z^2} + D_{r_i} B_{v_i, \alpha_i} u_{ki}(t, r, z) + S_{ki}(t, r, z), \quad r \in (R_{i-1}, R_i), i = \overline{1, m+1};$$

$$z \in (l_{k-1}, l_k), k = \overline{1, n+1}$$
(3.483)

за початковими та крайовими умовами

$$u_{ki}(t, r, z)|_{t=0} = g_{ri}(r, z), \quad (3.484)$$

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{1l}(t, r, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_{0l}(t, r), \quad \left[\left(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{n+1,l}(t, r, z) \Big|_{z=l} = \omega_{n+1,l}(t, r),$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} \left[r^{\alpha_{1-1}^{v_1}} u_{k,1}(t, r, z) \right] \Big|_{r=0} = 0, \quad \left[\left(\alpha_{r22}^{m+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{22}^{m+1} + \gamma_{22}^{m+1} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k,m+1}(t, r, z) \Big|_{r=R} = \omega_{k,m+1}(t, z),$$
(3.485)

та системою *mxn* - інтерфейсних умов

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^{ki} + \delta_{j1}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j1}^{ki} + \gamma_{j1}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1,i}(t, r, z) - \left[\left(\alpha_{j2}^{ki} + \delta_{j2}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{j2}^{ki} + \gamma_{j2}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k+1,i}(t, r, z) \right\} \Big|_{z=l_k} = \omega_{ki}^j(t, r);$$

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{rj1}^{ki} + \delta_{rj1}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{rj1}^{ki} + \gamma_{rj1}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k,i+1}(t, r, z) - \left[\left(\alpha_{j2}^{ki} + \delta_{j2}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{j2}^{ki} + \gamma_{j2}^{ki} \frac{\partial}{\partial t} \right] u_{k,i+1}(t, r, z) \right\} \Big|_{r=R_i} = \phi_{ki}^j(t, z);$$

$$j = 1, 2; k = \overline{1, n}; i = \overline{1, m}.$$
(3.486)

Тут $a_j > 0, \gamma_j^2 \geq 0, \beta \in (0, \infty); |\alpha_{11}^0| + |\beta_{11}^0| \neq 0, |\alpha_{22}^{n+1}| + |\beta_{22}^{n+1}| \neq 0; \tilde{\alpha}_{jk}^m = \alpha_{jk}^m - \delta_{jk}^m (\beta^2 + \gamma^2);$

$$\tilde{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_{jk}^m (\beta^2 + \gamma^2), m = 0, n+1; \gamma^2 = \max\{\gamma_1^2, \gamma_2^2, \dots, \gamma_{n+1}^2\}.$$

Крайову задачу (3.11)-(3.14) розв'язувалась з використанням в комбінації гібридних інтегральних перетворень Фур'є та Ганкеля 1-го роду, математичне обґрунтування застосування цього та інших типів інтегральних перетворень для неоднорідних середовищ викладено в [11].

Аналітичний розв'язок задачі. В результаті застосування до вихідної крайової задачі інтегрального перетворення Фур'є та Ганкеля 1-го роду відповідно по осевій і радіальній координатах, визначеними запровадженими нами гібридними інтегральними матричними операторами [11]

$$F_n[\dots] = \left[\int_{l_0}^{l_1} \dots V_1(z, \beta_{m_1}) \sigma_1 dz \int_{l_1}^{l_2} \dots V_2(z, \beta_{m_1}) \sigma_2 dz \dots \int_{l_{n-1}}^{l_n} \dots V_n(z, \beta_{m_1}) \sigma_n dz \int_{l_n}^{l_{n+1}} \dots V_{n+1}(z, \beta_{m_1}) \sigma_{n+1} dz \right],$$

$$\begin{aligned}
H_+[\dots] &= \left[\int_{R_0}^{R_1} \dots V_{\nu\alpha_1}(r, \eta_j) \sigma_{r_1} \rho^{2\alpha_1+1} dr \int_{R_1}^{R_2} \dots V_{\nu\alpha_2}(r, \eta_j) \sigma_{r_2} \rho^{2\alpha_2+1} dr \dots \int_{R_m}^{R_{m+1}} \dots V_{\nu\alpha_{m+1}}(r, \eta_j) \sigma_{r_{m+1}} \rho^{2\alpha_{m+1}+1} dr \right], \\
F_n^{-1}[\dots] &= \begin{bmatrix} \sum_{m_1=1}^{\infty} \dots V_1(z, \beta_{m_1}) \left(\|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2 \right)^{-1} \\ \sum_{m_1=1}^{\infty} \dots V_2(z, \beta_{m_1}) \left(\|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2 \right)^{-1} \\ \dots \\ \sum_{m_1=1}^{\infty} \dots V_{n+1}(z, \beta_{m_1}) \left(\|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2 \right)^{-1} \end{bmatrix}, \quad H_m^{-1}[\dots] = \begin{bmatrix} \sum_{j=1}^{\infty} \dots V_{\nu\alpha_1}(r, \eta_j) \left(\|V_{\nu\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2 \right)^{-1} \\ \sum_{j=1}^{\infty} \dots V_{\nu\alpha_2}(r, \eta_j) \left(\|V_{\nu\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2 \right)^{-1} \\ \dots \\ \sum_{j=1}^{\infty} \dots V_{\nu\alpha_{m+1}}(r, \eta_j) \left(\|V_{\nu\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2 \right)^{-1} \end{bmatrix},
\end{aligned}
\tag{3.487}$$

отримуємо єдиний розв'язок задачі (3.483)-(3.484)

$$\begin{aligned}
u_{ki}(t, r, z) &= \sum_{k_1=1}^{n+1} \sum_{i_1=1}^{m+1} \int_0^t \int_{R_{i_1-1}}^{R_{i_1}} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \mathcal{H}_{k, k_1, i, i_1}(t-\tau; r, \rho; z, \xi) \left[S_{k, i_1}(\tau, \rho, \xi) - g_{k, i_1}(\rho, \xi) \delta_+(\tau) \right] \sigma_{r_{i_1}} \rho^{2\alpha_{i_1}+1} d\rho \sigma_{k_1} d\xi d\tau + \\
&+ \int_0^t \sum_{i_1=1}^{m+1} \int_{R_{i_1-1}}^{R_{i_1}} \left[\mathcal{W}_{0, k, i, i_1}(t-\tau; r, \rho; z) \omega_{0, i_1}(\tau, \rho) + \mathcal{W}_{n+1, k, i, i_1}(t-\tau; r, \rho; z) \omega_{n+1, i_1}(\tau, \rho) \right] \sigma_{r_{i_1}} \rho^{2\alpha_{i_1}+1} d\rho d\tau + \\
&+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \mathcal{W}_{m+1, k, k_1}^{\nu\alpha}(t-\tau; r; z, \xi) \phi_{k_1, m+1}(\tau, \xi) \sigma_{k_1} d\xi d\tau + \\
&+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^n \sum_{i_1=1}^{m+1} \int_{R_{i_1-1}}^{R_{i_1}} \left[\mathcal{R}_{k, k_1; i, i_1}^{11}(t-\tau; r, \rho; z) \omega_{k, i_1}^1(\tau, \rho) - \mathcal{R}_{k, k_1; i, i_1}^{12}(t-\tau; r, \rho; z) \omega_{k, i_1}^2(\tau, \rho) \right] \sigma_{\nu\alpha_{i_1}} \rho^{2\alpha_{i_1}+1} d\rho d\tau + \\
&+ \int_0^t \sum_{i_1=1}^m \sum_{i_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \left[\mathcal{R}_{k, k_1; i, i_1}^{21}(t-\tau; r, z, \xi) \phi_{k_1, i}^1(\tau, \xi) - \mathcal{R}_{k, k_1; i, i_1}^{22}(t-\tau; r; z, \xi) \phi_{k_1, i}^2(\tau, \xi) \right] \sigma_{k_1} d\xi d\tau; \quad k = \overline{1, n+1}; i = \overline{1, m+1}
\end{aligned}
\tag{3.488}$$

Тут

- фундаментальні матриці Коші впливу неоднорідностей системи

$$\mathcal{H}_{k, k_1, i, i_1}(t, z, \xi) = \sum_{m_1=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_{m_1}^2 + \eta_j^2 + \chi_{n+1, m+1})t} \frac{V_k(z, \beta_{m_1}) V_{k_1}(\xi, \beta_{m_1})}{\|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2} \cdot \frac{V_{\nu\alpha_i}(r, \eta_j) V_{\nu\alpha_{i_1}}(\rho, \eta_j)}{\|V_{\nu\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2}; k, k_1 = \overline{1, n+1}; i, i_1 = \overline{1, m+1}$$

- матриці Гріна впливу крайових умов

$$\begin{aligned}
\mathcal{W}_{0, k, i, i_1}(t, r, \xi) &= -D_1 \sigma_1 \sum_{m_1=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_{m_1}^2 + \eta_j^2 + \chi_{n+1, m+1})t} \frac{V_1(l_0, \beta_{m_1}) V_k(z, \beta_{m_1})}{\left[\alpha_{11}^0 - \sigma_{11}^0 (\beta_{m_1}^2 + \chi_{n+1, m+1}) \right] \|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2} \frac{V_{\nu\alpha_i}(r, \eta_j) V_{\nu\alpha_{i_1}}(\rho, \eta_j)}{\|V_{\nu\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2}, \\
\mathcal{W}_{n+1, k, i, i_1}(t, r, \xi) &= \sum_{m_1=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_{m_1}^2 + \eta_j^2 + \chi_{n+1, m+1})t} \frac{V_i(z, \beta_{m_1}) V_{n+1}(l, \beta_{m_1})}{\left[\alpha_{22}^{n+1} - \sigma_{22}^{n+1} (\beta_{m_1}^2 + \chi_{n+1, m+1}) \right] \|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2} \frac{V_{\nu\alpha_i}(r, \eta_j) V_{\nu\alpha_{i_1}}(\rho, \eta_j)}{\|V_{\nu\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2}; k = \overline{1, n+1}
\end{aligned}$$

$$\mathcal{W}_{m+1,i,k,i_1}^{v\alpha}(t,r,\xi) = D_{r_{m+1}} \sigma_{r_1} \sum_{m_1=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_{m_1}^2 + \eta_j^2 + \chi_{n+1,m+1})t} \frac{[\delta_{22}^{m+1} V_{v\alpha_i}'(R_{m+1}, \eta_j) + \gamma_{22}^{m+1} V_{v\alpha_i}(R_{m+1}, \eta_j)] V_{v\alpha_i}(r, \eta_j)}{[\alpha_{22}^{m+1} \gamma_{22}^{m+1} - \beta_{22}^{m+1} \delta_{22}^{m+1}] \|V_{v\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2} \cdot \frac{V_k(z, \beta_{m_1}) V_{k_1}(\xi, \beta_{m_1})}{\|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2},$$

- матриці Гріна, породжені системою nxt - інтерфейсних взаємодій

$$\mathcal{R}_{k,k_1,i,i_1}^{11}(t,r,z) =$$

$$(-1)^s - \frac{D_{k_1} \sigma_{k_1}}{c_{11,k_1}} \sum_{m_1=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_{m_1}^2 + \eta_j^2 + \chi_{n+1,m+1})t} \frac{\tilde{\alpha}_{p2}^{k_1} V_{k_1+1}'(l_{k_1}, \beta_{m_1}) + \tilde{\beta}_{p2}^{k_1} V_{k_1+1}(l_{k_1}, \beta_{m_1})}{\|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2} V_k(z, \beta_{m_1}) \frac{V_{v\alpha_i}(r, \eta_j) V_{v\alpha_{i_1}}(\rho, \eta_j)}{\|V_{v\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2}$$

$$\mathcal{R}_{k,k_1,i,i_1}^{2s}(t,r,z) =$$

$$(-1)^s \frac{D_{r_i} \sigma_{r_i}}{c_{r11,i}} R^{2\alpha_i+1} \sum_{m_1=1}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_{m_1}^2 + \eta_j^2 + \chi_{n+1,m+1})t} \frac{\left(\tilde{\alpha}_{rp2}^{i_1} \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{rp2}^{i_1} \right) V_{v\alpha_{i_1}}(R_{i_1}, \eta_j)_{r=R_{i_1}} V_{v\alpha_{i_1}}(r, \eta_j)}{\|V_{v\alpha}(r, \eta_j)\|_1^2} \cdot \frac{V_k(z, \beta_{m_1}) V_{k_1}(\xi, \beta_{m_1})}{\|V(z, \beta_{m_1})\|_1^2}$$

$$s = \begin{cases} 1, & p = 2 \\ 2, & p = 1 \end{cases}$$

Список джерел до розділу 3

1. Агранович М.С., Вышик М.И. Эллиптические задачи с параметром и параболические задачи общего вида // Успехи мат. наук. - 1964. - Т. 19. - № 3. - С. 53-161.
2. Антонцев С.Н., Монахов В.Н. Пространственные задачи нестационарной двухфазной фильтрации в неоднородных анизотропных пористых средах // Докл. АН СССР.- 1978.- 243, №3.- С. 553-556.
3. Бомба А.Я., Хлапук М.М., Сидорчук Б.П. Про моделювання взаємодії фільтрації та механічної суфозії // Вісник УДАВГ. “Сучасні проблеми теорії фільтрації”.- Рівне: УДАВГ.- 1998.- С. 157-166.
4. Боли Б., Уэйнер Дж. Теория температурных напряжений.- М.: Мир, 1964. - 517 с.
5. Булавацький В.М. Біпараболічна математична модель процесу фільтраційної консолідації // Доп. НАН України. - 1997. - № 8. -С.13-17.
6. Бурак Я.Й., Кондрат В.Ф. Рівняння електродинаміки повільно рухомих пористих насичених тіл // Волинський математичний вісник.- Рівне.- 2001.- Випуск 8.- С. 27-32.
7. Быблив О.Я., Ленюк М.П. Интегральные преобразования Ханкеля 1-го рода для кусочно-однородных сегментов с применением к задачам математической физики // Вычисл. и прикл. математика. - 1988. - № 65. - С. 24 - 34.
8. Вартапетян Р.Ш., Волощук А.М., Дубинин М.М., Якубов Т.С. Адсорбция паров воды и микропористые структуры углеводородных адсорбентов// Известия Вузов СССР (сер. хим.).- 1987.-9. С.1934-1938.
9. Векуа И.Н. Обобщенные аналитические функции.- М.: Физматгиз, 1959.- 628 с.
10. Градштейн И.С., Рыжик И.М. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. - М.: Наука, 1971. - 1108 с.

11. Гюнтер Н.М. Теория потенциала и ее применение к основным задачам математической физики. - М.: Гос. изд. техн. лит., 1953. - 416 с.
12. Комаров Г.М. Математичні моделі і наближені методи розв'язування нелінійних проблем термопружності: Дис... д-ра. фіз.-мат. наук: 01.01.03. - К.: 1995. - 312 с.
13. Комаров Г.М., Ленюк М.П., Мороз В.В. Скінченні гібридні інтегральні перетворення, породжені диференціальними рівняннями другого порядку. - Чернівці: Прут, 2001. - 228 с
14. Кошляков Н.С., Глинер Э.Б., Смирнов М.М. Уравнения в частных производных математической физики.- М.: Высш. школа, 1970. -710с.
15. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного.- М.: Наука, 1973.- 736 с.
16. Ленюк М.П. Исследование основных краевых задач для диссипативного волнового уравнения Бесселя: Препр. / АН УССР. Ин-т математики; 83-3. - К.: 1983. - 62 с.
17. Ленюк М.П. Гибридные интегральные преобразования (Фурье-Бесселя, Бесселя-Фурье, Бесселя-Бесселя, Вебера-Фурье, Вебера-Бесселя): Препр. / АН УССР. Ин-т математики; 85-28. - К.: 1985. - 64 с.
18. Ленюк М.П. Интегральные преобразования с разделенными переменными (Фурье, Ханкеля): Препр. / АН УССР. Ин-т математики; 83-4. - К.: 1983 - 60 с.
19. Ленюк М.П. Узагальнення інтегралу Фур'є-Бесселя // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: 36. наук. пр. - К.: Ін-т математики АН України, 1993. - Вип. 2.- ч. 1. - С. 79- 91.
20. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. - К: Наук. думка, 2000. - 372.
21. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для n- інтерфейсних неоднорідних і нанопористих напівобмежених середовищ// Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика .- 2003. - Вип.1.-С. 69-95
22. Лыков А.В. Теория теплопроводности.- М.: Высшая школа, 1967
23. Лыков А.В. Михайлов Ю.А. Теория масопереноса.- М.: Гос-энергоиздат, 1963. - 535с.
24. Петрик М., Баб'юк М. Двовимірна осесиметрична модель кінетики абсорбційного масопереносу для двоскладового кусково-однорідного середовища "Рідина – тверде тіло"/ Праці Другого Міжн. Смакулового симпозіуму " Проблеми сучасної фізики".- Т.1. — Тернопіль: ТДТУ ім. Ів.Пулюя, 2000. - С. 58-59.
25. Петрик М.Р., Баб'юк М.П. Осесиметрична математична модель адсорбційного масопереносу зі спектральним параметром для обмеженого двоскладового кусково однорідного (по вісі z) середовища// Труды Института прикладной математики и механики НАНУ. Сб. научн. труд. - Донецьк: Ін-т ПММ НАНУ, 2001.- Т.6. - С. 95-100.
26. Петрик М., Баб'юк М. Осесиметрична математична модель адсорбційного масопереносу зі спектральним параметром для напівобмеженого двоскладового кусково-однорідного (по вісі r) середовища// Вісник Тернопільського державного технічного університету.- 2002. -Т.7. -№3.- С.96-102.
27. Петрик М., Баб'юк М. Основи математичного моделювання у наукових дослідженнях.- Тернопіль: Підручники і посібники, 1998.- 160с.

28. Петрик М.Р., Свистун І.А. Математичне моделювання процесів фільтраційно–дифузійного вологомасопереносу для осесиметричних неоднорідних пористих структур // Сучасні проблеми математики.: Мат. міжн. наук. конф.– 4.2.– К.: Ін-т математики НАН України, 1998. – С. 198-201.
29. Степанов В. В. Курс дифференциальных уравнений.– М.: Физматгиз, 1959.– 468 с.
30. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики.– М.: Наука, 1972.– 735с.
31. Федоткин И.М., Айзен А.М. Асимптотические методы в задачах тепломасопереноса. К.: Вища школа, 1975.– 197 с.
32. Шилов Г.Е. Математический анализ. Второй специальный курс.– М.: Наука, 1965– 328 с.
33. Neviside O. Eelectromagnetic Theory, London, 1983

$$\lim_{r \rightarrow R_0} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^{\alpha_0 - \nu_0} C_1(t, r) \right] = 0; \left[(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1}) \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1}) \frac{\partial}{\partial t} \right] C_{n+1}(t, r) \Big|_{r=R_{n+1}} = \omega_{n+1}(t) \quad (4.4)$$

та системою n - інтерфейсних умов по координаті r

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha_{j1}^1 + \frac{\partial}{\partial t} \delta_{j1}^1 \right) + \beta_{j1}^1 + \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{j1}^1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha_{jn}^n + \frac{\partial}{\partial t} \delta_{jn}^n \right) + \beta_{jn}^n + \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{jn}^n \end{pmatrix} \begin{bmatrix} C_1(t, r)_{r=R_1} \\ \dots \\ C_n(t, r)_{r=R_n} \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha_{j1}^1 + \frac{\partial}{\partial t} \delta_{j1}^1 \right) + \beta_{j1}^1 + \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{j1}^1 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \frac{\partial}{\partial r} \left(\alpha_{jn}^n + \frac{\partial}{\partial t} \delta_{jn}^n \right) + \beta_{jn}^n + \frac{\partial}{\partial t} \gamma_{jn}^n \end{pmatrix} \begin{bmatrix} C_2(t, r)_{r=R_1} \\ \dots \\ C_{n+1}(t, r)_{r=R_n} \end{bmatrix} \quad (4.5)$$

Тут C_j , a_j - концентрації адсорбтиву відповідно в міжчастинковому просторі та мікро і нанопорах частинок (твердій фазі) для j -го шару неоднорідного нанопористого середовища $j = \overline{1, n+1}$. В подальшому використовувати позначення $B_{\nu \alpha_j} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} (2\alpha_j + 1) \frac{d}{dr} - (\nu_j^2 - \alpha_j^2) r^{-2}$ - як диференціальний оператор Бесселя для n - інтерфейсного середовища.

4.1.2. Схема лінеаризації нелінійної циліндричної моделі

Розв'язок нелінійної крайової задачі задачі (4.3)-(4.6) шукатимемо у вигляді асимптотичних сум:

$$\begin{bmatrix} C_1(t, r) \\ C_2(t, r) \\ \dots \\ C_{n+1}(t, r) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_{1_0}(t, r) \\ C_{2_0}(t, r) \\ \dots \\ C_{n+1_0}(t, r) \end{bmatrix} + \varepsilon \begin{bmatrix} C_{1_1}(t, r) \\ C_{2_1}(t, r) \\ \dots \\ C_{n+1_1}(t, r) \end{bmatrix} + \varepsilon^2 \begin{bmatrix} C_{1_2}(t, r) \\ C_{2_2}(t, r) \\ \dots \\ C_{n+1_2}(t, r) \end{bmatrix} + \dots, \\ \begin{bmatrix} a_1(t, r) \\ a_2(t, r) \\ \dots \\ a_{n+1}(t, r) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{1_0}(t, r) \\ a_{2_0}(t, r) \\ \dots \\ a_{n+1_0}(t, r) \end{bmatrix} + \varepsilon \begin{bmatrix} a_{1_1}(t, r) \\ a_{2_1}(t, r) \\ \dots \\ a_{n+1_1}(t, r) \end{bmatrix} + \varepsilon^2 \begin{bmatrix} a_{1_2}(t, r) \\ a_{2_2}(t, r) \\ \dots \\ a_{n+1_2}(t, r) \end{bmatrix} + \dots, \quad (4.6)$$

В результаті підстановки асимптотичних сум (4.7) вихідна нелінійна крайова задача (4.1)-(4.6) розщеплюється на наступні типи лінеаризованих підзадач:

Задача A_{k_0} (нульові наближення з початковими та крайовими умовами вихідної задачі): Знайти обмежений в області D_n розв'язок системи рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial C_{k_0}(t, r)}{\partial t} + \frac{\partial a_{k_0}(t, r)}{\partial t} + \eta_{k_0}^2 C_{k_0} = D_k B_{\nu \alpha_k} [C_{k_0}] + f_k(t, r) \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial a_{k_0}}{\partial t} = \beta_k (C_{k_0} - \gamma_k a_{k_0}) \quad (4.8)$$

за початковими умовами :

$$C_{k_0}(t, r)_{t=0} = C_{0_k}(z); a_{k_0}(t, r)_{t=0} = a_{0_k}(r); \quad (4.9)$$

крайовими умовами та системою n -інтерфейсних умов третього роду по геометричній змінній z :

$$\begin{aligned} [(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t})] C_{1_0}(t, r) \Big|_{z=R_0} &= \omega_0(t); \\ [(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t})] C_{n+1_0}(t, r) \Big|_{r=R_{n+1}} &= \omega_{n+1}(t) \\ \left[[(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t})] C_{k_0}(t, r) - [(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t})] C_{k+1_0}(t, r) \right] \Big|_{r=R_k} &= 0; \\ k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2} \end{aligned} \quad (4.10)$$

Задача $A_{k_m}; m = \overline{1, \infty}$ (m -ні наближення з нульовими початковими умовами і крайовими умовами): побудувати в області D_n обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial C_{k_m}(t, r)}{\partial t} + \frac{\partial a_{k_m}(t, r)}{\partial t} + \eta_{k_m}^2 C_{k_m} = D_k B_{\nu \alpha_k} [C_{k_m}] + f_{k_{m-1}}(t, r) \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial a_{k_m}}{\partial t} = \beta_k (C_{k_m} - \gamma_k a_{k_m} - \sum_{i=0}^{m-1} a_i \cdot a_{m-1-i}) \quad (4.13)$$

з нульовими початковими і крайовими умовами.

$$\text{Тут } f_{k_{m-1}}(t, r) = \sum_{i=0}^{m-1} D_k B_{\nu \alpha_k} [C_{k_i}(t, r)] \cdot C_{k_{m-1-i}}(t, r).$$

Задача A_{k_0} є лінійною відносно нульового наближення a_{k_0} , задача A_{k_m} , $m = \overline{1, \infty}$ є лінійною відносно m -го наближення a_{k_m} і нелінійною відносно усіх попередніх $m-1$ наближень $a_{k_0}, \dots, a_{k_{m-1}}$. Рівняння (4.7), (4.8), (4.12), (4.13) одержані шляхом лінеаризації нелінійного диференціального рівняння кінетики адсорбції з допомогою асимптотичних сум (4.8), групуючи доданки у рівняннях та умовах

лівих і правих частин вихідної крайової задачі при однакових степенях параметру ε .

4.1.3. Побудова розв'язку лінеаризованої системи задач

Теорема 4.1 (про розв'язність): Якщо вектор-функції лінеаризованої змішаної крайової задачі (4.9)-(4.13) $f(t, r), \omega_{n+1}(t)$ є оригіналами за Лапласом по змінній t і вектор-функції $f(t, r), C_0(r), a_0(r)$ задовольняють умови Гельдера з показником α по r ($0 < \alpha \leq 1$) $|g(r) - g(\rho)| \leq A \cdot |r - \rho|^\alpha$; $A < \infty$, то розв'язок крайової задачі (4.1)-(4.5) існує і єдиний.

Доведення: Припустивши, що шукані вектор – функції $C(t, r), a(t, r)$ є оригіналами за Лапласом, застосуємо до лінеаризованої крайової задачі (4.1)-(4.5) інтегральне перетворення Лапласа стосовно часової змінної t [3]. В результаті отримаємо крайову задачу: побудувати обмежений на множині $I_n = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 = 0, R_{n+1} < \infty \right\}$ розв'язок системи диференціальних рівнянь Бесселя для модифікованих функцій

$$\left[B_{\nu_{\alpha_j}} - q_j^2(p) \right] C_j^*(p, r) = -\mathcal{F}_j^*(p, r) \quad (4.14)$$

за крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow R_0} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^{\alpha_0 - \nu_0} C_1^*(p, r) \right] = 0; \left[\bar{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial r} + \bar{\beta}_{22}^{n+1} \right] C_{n+1}^*(p, r) \Big|_{r=R_{n+1}} = \omega_{R_{n+1}}^*(p); \quad (4.15)$$

та умовами інтерфейсу r :

$$\left[\left(\bar{\alpha}_{i1}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{i1}^j \right) C_j^*(p, r) - \left(\bar{\alpha}_{i2}^k \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{i2}^k \right) C_{j+1}^*(p, r) \right] \Big|_{r=R_j} = \omega_{ij}; j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}. \quad (4.16)$$

$$\text{Тут } \mathcal{F}_j^*(p, r) = \frac{1}{D_{r_j}} [f_j^*(p, r) + C_{o_j}(r) + \frac{\beta_j \gamma_j}{p + \beta_j \gamma_j} a_{0_j}(r)];$$

$$\omega_{R_{n+1}}^*(p) = \omega_{n+1}^*(p) + \left(\delta_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \gamma_{22}^{n+1} \right) C_{0_{n+1}}(R_{n+1}) \equiv \omega_{n+1}^*(p) + \omega_{n+1,1};$$

$$\omega_{ij} = \left[\left(\delta_{i1}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i1}^j \right) C_{0_i}(r) - \left(\delta_{i2}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i2}^j \right) C_{0_{j+1}}(r) \right]_{r=R_j};$$

$$q_j^2(p) = \frac{1}{D_{r_j}(p + \beta_j \gamma_j)} \left[p^2 + p(\beta_j(1 + \gamma_j) + \eta_j^2) + \beta_j \gamma_j \cdot \eta_j^2 \right];$$

$\bar{\alpha}_{im}^j = \alpha_{im}^j + \delta_{im}^j \cdot p$; $\bar{\beta}_{im}^j = \beta_{im}^j + \gamma_{im}^j \cdot p$; $j = \overline{1, n}$; $i, m = \overline{1, 2}$. Тут p – комплексно значний спектральний параметр інтегрального перетворення Лапласа, що присутній в крайових умовах та умовах інтерфейсу (4.8), (4.9). При цьому

$$a_j^*(p, r) = \frac{a_{0j}(r)}{p + \beta_j \gamma_j} + \frac{\beta_j}{p + \beta_j \gamma_j} C_j^*(p, r); j = \overline{1, n+1}. \quad (4.17)$$

Зафіксуємо гілку дволистої функції $q_j(p)$, на якій $\operatorname{Re} q_j(p) > 0$. Внаслідок властивостей функцій $I_{\nu\alpha}(r)$, $K_{\nu\alpha}(r)$, які утворюють фундаментальну систему розв'язків рівняння Бесселя (4.6), розв'язок неоднорідної крайової задачі (4.14)-(4.16) будемо методом функцій Коші [11]:

$$C_1^*(p, r) = A_1 \cdot I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) + \int_0^{R_1} \mathcal{E}_{\nu\alpha_1}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_1^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_1+1} d\rho;$$

$$C_j^*(p, r) = A_j \cdot I_{\nu\alpha_j}(q_j r) + B_j \cdot K_{\nu\alpha_j}(q_j r) + \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; j = \overline{2, n+1}; \quad (4.18)$$

де $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$, $j = \overline{1, n+1}$ - функції Коші, що задовольняють умови:

$$\begin{cases} \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} = 0; \\ \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} = -\rho^{-(2\alpha_j+1)}. \end{cases} \quad (4.19)$$

Функції Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$, $j = \overline{1, n+1}$ шукаємо у такому вигляді:

$$\mathcal{E}_{\nu\alpha_1}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu\alpha_1}^{-*} = D_{1_1} I_{\nu_1\alpha_1}(q_1 r); 0 < r < \rho < R_1 \\ \mathcal{E}_{\nu\alpha_1}^{+*} = D_{2_1} I_{\nu_1\alpha_1}(q_1 r) + E_{2_1} K_{\nu_1\alpha_1}(q_1 r); 0 < \rho < r < R_1 \end{cases}$$

$$\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^{-*} = D_{1_j} I_{\nu_j\alpha_j}(q_j r) + E_{1_j} K_{\nu_j\alpha_j}(q_j r); R_{j-1} < r < \rho < R_j \\ \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^{+*} = D_{2_j} I_{\nu_j\alpha_j}(q_j r) + E_{2_j} K_{\nu_j\alpha_j}(q_j r); R_{j-1} < \rho < r < R_j \end{cases}; j = \overline{2, n+1}. \quad (4.20)$$

Функції Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ задовольняють ще додаткові однорідні умови для $j = \overline{2, n+1}$:

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^{j-1} \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{12}^{j-1} \right) \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^* \Big|_{r=R_{j-1}} = 0 \text{ (перша права умова } j\text{-}I\text{-го інтерфейсу – на межі } r=R_{j-1}), \quad (4.21)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{ss}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{ss}^j \right) \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^* \Big|_{r=l_j} = 0 \text{ (} I\text{-ша ліва умова } j\text{-го інтерфейсу : на межі } r=R_j, s=\begin{cases} 1 & ; j=\overline{2, n} \\ 2 & ; j=n+1 \end{cases}), \quad (4.22)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{11}^1 \right) \mathcal{E}_{\nu\alpha_1}^* \Big|_{r=R_1} = 0 \text{ (} I\text{-ша ліва крайова умова на межі } r=R_1) \quad (4.23)$$

Шляхом підстановки виразів $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho), k = \overline{1, n+1}$ (4.15) в умови (4.19), (4.21) - (4.23) отримуємо вирази для визначення сталих:

$$D_{2_1} - D_{1_1} = -q_1^{2\alpha_1} K_{\nu_1\alpha_1}(q_1\rho); \quad E_{2_1} = q_1^{2\alpha_1} I_{\nu_1\alpha_1}(q_1\rho);$$

$$D_{2_k} - D_{1_k} = -q_k^{2\alpha_k} K_{\nu_k\alpha_k}(q_k\rho); \quad E_{2_k} - E_{1_k} = q_k^{2\alpha_k} I_{\nu_k\alpha_k}(q_k\rho); k = \overline{2, n+1}.$$

У результаті функції Коші $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho); k = \overline{1, n+1}$ є визначені і внаслідок симетрії відносно діагоналі $r = \rho$ мають таку структуру:

$$\mathcal{E}_{\nu\alpha_1}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{U_{\nu\alpha_{11}}^{II}(q_1 R_1)} \begin{cases} I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{11}}^I(q_1 R_1, q_1 \rho), 0 < r < \rho < R_1; \\ I_{\nu\alpha_1}(q_1 \rho) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{11}}^I(q_1 R_1, q_1 r), 0 < \rho < r < R_1 \end{cases};$$

$$\mathcal{E}_{\nu\alpha_k}^*(p, r, \rho) = \frac{q_k^{2\alpha_k}}{A_{\nu\alpha_{1s}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k)} \begin{cases} \Phi_{\nu\alpha_{ss}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r), R_{k-1} < r < \rho < R_k \\ \Phi_{\nu\alpha_{ss}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho), R_{k-1} < \rho < r < R_k \end{cases}, \quad (4.24)$$

$$s = \begin{cases} 1 & ; k = \overline{2, n}; \\ 2 & ; k = n+1 \end{cases};$$

$$\Delta_{\nu\alpha_{im}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu\alpha_{k2}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{km1}}^{k,2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{k2}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{km1}}^{k,1}(q_k R_k); k = \overline{2, n+1}; i, m = \overline{1, 2};$$

$$\Delta_{\nu\alpha_{1j}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) = U_{\nu\alpha_{n+1j2}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) U_{\nu\alpha_{n+122}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) - U_{\nu\alpha_{n+1j2}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) U_{\nu\alpha_{n+122}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}); j = \overline{1, 2}.$$

Тут

$$U_{\nu\alpha_{im}}^{j1}(q_s R_j) = \left(\bar{\alpha}_{im}^j \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{im}^j \right) I_{\nu_j\alpha_j}(q_s r) \Big|_{r=R_j} = \left(\bar{\alpha}_{im}^j \frac{v_j - \alpha_j}{R_j} + \bar{\beta}_{im}^j \right) I_{\nu_j\alpha_j}(q_s R_j) + \bar{\alpha}_{im}^j R_j q_s^2 I_{\nu_j+1, \alpha_j+1}(q_s R_j)$$

$$U_{\nu\alpha_{im}}^{j2}(q_s R_j) = \left(\bar{\alpha}_{im}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{im}^j \right) K_{\nu_j\alpha_j}(q_s r) \Big|_{r=R_j} = \left(\bar{\alpha}_{im}^j \frac{v_j - \alpha_j}{R_j} + \bar{\beta}_{im}^j \right) K_{\nu_j\alpha_j}(q_s R_j) - \bar{\alpha}_{im}^j R_j q_s^2 K_{\nu_j+1, \alpha_j+1}(q_s R_j)$$

$$\Phi_{\nu\alpha_{im}}^j(q_s R_j, q_s r) = U_{\nu\alpha_{im}}^{j1}(q_s R_j) \cdot K_{\nu_j \alpha_j}(q_s r) - U_{\nu\alpha_{im}}^{j2}(q_s R_j) \cdot I_{\nu_j \alpha_j}(q_s r).$$

Крайові та інтерфейсні умови (4.15), (4.16) з врахуванням формул (4.18) для функцій Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ (4.25) дають алгебраїчну систему із $2n+1$ - го рівняння для визначення невідомих коефіцієнтів A_l, A_j, B_j , $j = \overline{2, n+1}$, що беруть участь у структурах (4.13) загального розв'язку крайової задачі (4.6)-(4.8) $C_j^*(p, r)$:

$$\left. \begin{aligned} & U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1) A_1 - U_{\nu\alpha_{12}}^{11}(q_2 R_1) A_2 - U_{\nu\alpha_{12}}^{12}(q_2 R_1) B_2 = \omega_{1_1} \\ & U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1 R_1) A_1 + U_{\nu\alpha_{21}}^{12}(q_1 R_1) B_1 - U_{\nu\alpha_{22}}^{11}(q_2 R_1) A_2 - U_{\nu\alpha_{22}}^{12}(q_2 R_1) B_2 = \omega_{2_1} + G_1^* \\ & \text{-----} \\ & U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) A_k + U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) B_k - U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1} R_k) A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k2}(q_{k+1} R_k) B_{k+1} = \omega_{1_k} \\ & U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}(q_k R_k) A_k + U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) B_k - U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1} R_k) A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1} R_k) B_{k+1} = \omega_{2_k} + G_k^* \\ & \text{-----} \\ & U_{\nu\alpha_{11}}^{n,1}(q_n R_n) A_n + U_{\nu\alpha_{11}}^{n,2}(q_n R_n) B_n - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) A_{n+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) B_{n+1} = \omega_{1_n} \\ & U_{\nu\alpha_{21}}^{n,1}(q_n R_n) A_n + U_{\nu\alpha_{21}}^{n,2}(q_n R_n) B_n - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) A_{n+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) B_{n+1} = \omega_{2_n} + G_n^* \\ & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}) A_{n+1} + U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) B_{n+1} = \omega_{R_{n+1}}^*(p) \end{aligned} \right\}. \quad (4.25)$$

Тут G_j^* вирази, що містять інтеграли від функцій Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ в (4.24) та обчислюються за формулою:

$$\begin{aligned} G_1^* &= \frac{c_{1_1}}{R_1^{2\alpha_1+1}} \int_0^{R_1} \frac{I_{\nu\alpha_1}(q_1 \rho)}{U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1)} \mathcal{F}_1^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_1+1} d\rho - \frac{c_{2_1}}{R_1^{2\alpha_2+1}} \int_{R_1}^{R_2} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{11}}^2(q_2 R_2, q_2 \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_2 R_1, q_2 R_2)} \mathcal{F}_2^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_2+1} d\rho; \\ G_j^* &= \frac{c_{1_j}}{R_j^{2\alpha_j+1}} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_j R_{j-1}, q_j R_j)} \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho - \frac{c_{2_j}}{R_j^{2\alpha_{j+1}+1}} \int_{R_j}^{R_{j+1}} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{11}}^{j+1}(q_{j+1} R_{j+1}, q_{j+1} \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{j+1} R_j, q_{j+1} R_{j+1})} \mathcal{F}_{j+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{j+1}+1} d\rho; j = \overline{1, n-1}, \\ G_n^* &= \frac{c_{1_n}}{R_n^{2\alpha_n+1}} \int_{R_{n-1}}^{R_n} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{n-1}(q_n R_{n-1}, q_n \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_n R_{n-1}, q_n R_n)} \mathcal{F}_n^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_n+1} d\rho - \frac{c_{2_n}}{R_n^{2\alpha_{n+1}+1}} \int_{R_n}^{R_{n+1}} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} R_{n+1}, q_{n+1} \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1})} \mathcal{F}_{n+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{n+1}+1} d\rho, \end{aligned}$$

де $c_{j_k} = \bar{\alpha}_{2j}^k \cdot \bar{\beta}_{1j}^k - \bar{\alpha}_{1j}^k \cdot \bar{\beta}_{2j}^k; k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2}$;

$$-\frac{c_{1_k}}{q_k^{2\alpha_k} \cdot R_k^{2\alpha_k+1}} = \begin{vmatrix} U_{\nu\alpha_{11}}^{k,1}(q_k R_k) & U_{\nu\alpha_{11}}^{k,2}(q_k R_k) \\ U_{\nu\alpha_{21}}^{k,1}(q_k R_k) & U_{\nu\alpha_{21}}^{k,2}(q_k R_k) \end{vmatrix}; \quad -\frac{c_{2_k}}{q_{k+1}^{2\alpha_{k+1}} \cdot R_{k+1}^{2\alpha_{k+1}+1}} = \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{12}}^{k,1}(q_{k+1} R_k) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{k,2}(q_{k+1} R_k) \\ -U_{\nu\alpha_{22}}^{k,1}(q_{k+1} R_k) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{k,2}(q_{k+1} R_k) \end{vmatrix}; k = \overline{1, n}$$

Припустимо, що умова однозначної розв'язності крайової задачі (4.14)-(4.16) виконана, тобто визначник алгебраїчної системи (4.25) є відмінним від нуля:

$$\Delta_{\nu\alpha}^*(p) \equiv \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) \Delta'_{\overline{1, 2n-1}} - \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) \Delta_{\overline{1, 2n-1}} \neq 0. \quad (4.26)$$

Визначивши $A_k, B_k, D_{1_k}, D_{2_k}, E_{1_k}, E_{2_k}, k = \overline{1, n+1}$ у (4.14) та після низки перетворень отримуємо рекурентні вирази для обчислення компонент $C_k^*(p, r)$ вектор-функції $C^*(p, r)$ - єдиного розв'язку крайової задачі (4.15)-(4.17):

$$C_k^*(p, r) = W_{k_{n+1}}^*(p, r) \cdot \omega_{R_{n+1}}^*(p) + \sum_{j=1}^n \left[\mathcal{R}_{1_{k,j}}^*(p, r) \cdot \omega_{1_j} + \mathcal{R}_{2_{k,j}}^*(p, r) \cdot \omega_{2_j} \right] + \sum_{j=1}^{n+1} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho) \cdot \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; k = \overline{1, n+1}; R_0 = 0 \quad (4.27)$$

Тут головні розв'язки [4] крайової задачі (4.14)-(4.16) подані нижче.

Вектор функцій впливу правої крайової умови $\omega_{R_{n+1}}^*(p)$ на k -ий сегмент середовища $W_{n+1_k}^*(p, r)$:

$$W_{k_{n+1}}^*(p, z) = \begin{cases} -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) & ; k = 1 \\ -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-1}' - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-1}' \right] & ; k = \overline{2, n} \\ \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{12}}^n(q_{n+1} r, q_{n+1} R_n) \cdot \Delta_{1,2n-1}' - \Phi_{\nu\alpha_{22}}^n(q_{n+1} r, q_{n+1} R_n) \cdot \Delta_{1,2n-1}' \right] & ; k = n+1 \end{cases} \quad (4.28)$$

Матриця функції впливу j - го джерела $\mathcal{F}_j^*(p, \rho)$ на k -ий сегмент нанопористого середовища $\left[\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho) \right]$:

впливу j - го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) на l -ий сегмент середовища:

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{11}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} I_{\nu\alpha_1}(q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A_{1,1}' - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A_{1,1}' \right], 0 < \rho < r < R_1 \\ I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A_{1,1}' - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A_{1,1}' \right], 0 < r < \rho < R_1 \end{cases}; j = \overline{2, n};$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{1j}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_j^{2\alpha_j} \cdot \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A_{1,2j-1}' - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A_{1,2j-1}' \right]; j = \overline{2, n}; \quad (4.29)$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{1,n+1}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \cdot I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1});$$

впливу j - го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) k - ий сегмент ($k = \overline{2, n}$) середовища:

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \cdot \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} I_{\nu\alpha_1}(q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{1,2k-1}' - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{1,2k-1}' \right]$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) &= -\frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{\overline{1,2k-1}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{\overline{1,2k-1}} \right] \cdot; \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{\overline{1,2j-3}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta'_{\overline{1,2j-3}} \right]; j = \overline{2, k-1}; k = \overline{2, n} \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-3}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-3}} \right] \cdot; \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) \cdot A'_{\overline{1,2j-1}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) \cdot A_{\overline{1,2j-1}} \right]; j = \overline{k+1, n}; k = \overline{2, n} \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kk}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta_{\overline{1,2k-3}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta'_{\overline{1,2k-3}} \right] \cdot \right. \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A'_{\overline{1,2k-1}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{\overline{1,2k-1}} \right], R_{k-1} < \rho < r < R_k \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot A'_{\overline{1,2k-1}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot A_{\overline{1,2k-1}} \right], R_{k-1} < r < \rho < R_k \\
&\left. \right\}; (4.30) \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,n+1}}^*(p, r, \rho) &= -\frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p) \cdot \Delta_{\nu\alpha_{11}}^*} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} \rho; q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-3}} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{\overline{1,2k-3}} \right]; \\
&k = \overline{2, n}
\end{aligned}$$

впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) на $n+1$ -ий сегмент середовища :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,l}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{12}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) ; \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,j}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{12}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta'_{\overline{1,2j-3}} - \Phi_{22}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{\overline{1,2j-3}} \right], j = \overline{2, n} ; (4.31) \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,n+1}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{12}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta'_{\overline{1,2n-1}} - \Phi_{22}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta_{\overline{1,2n-1}} \right], R_n < \rho < r < R_{n+1} ; \right. \\
&\left. \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{12}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta'_{\overline{1,2n-1}} - \Phi_{22}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta_{\overline{1,2n-1}} \right], R_n < r < \rho < R_{n+1} \right\} ;
\end{aligned}$$

Вектор функції впливу неоднорідностей першої умови j -го інтерфейсу ω_{1_j} , $j = \overline{1, n}$ на k -ий сегмент середовища $\mathcal{R}_{1_{k,j}}^*(p, z)$; $k = \overline{1, n+1}$; $j = \overline{1, n}$:

- впливу неоднорідностей першої умови j -го інтерфейсу ω_{1_j} на перший сегмент середовища $\mathcal{R}_{1_{1,j}}^*(p, z)$; $j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{1,j}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) A_{1,1} & ; j = 1 \\ \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) A_{1,2j-1} & ; j = \overline{2, n-1}, \\ \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) \Delta_{\nu\alpha_1}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = n \end{cases} \quad (4.32)$$

- впливу неоднорідностей першої умови j -го інтерфейсу $\omega_{1,j}, j = \overline{1, n}$ на k -ий сегмент середовища $\mathcal{R}_{1,k,j}^*(p, z); k = \overline{2, n}; j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{1,j}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1 R_1) \prod_{s=2}^{k-1} \frac{-c_{1s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{\nu\alpha_{12}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right) & ; j = 1 \\ \Delta'_{1,2j-1} \prod_{s=j+1}^{k-1} \frac{-c_{1s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right) & ; j = \overline{2, k-1} \\ A_{1,2k-1} \left(\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j = k \\ A_{1,2j-1} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j = \overline{k+1, n-1} \\ \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) \prod_{s=k}^{n-1} \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j = n \end{cases} \quad (4.33)$$

- впливу неоднорідностей першої умови j - го інтерфейсу $\omega_{1,j}, j = \overline{1, n}$ на $n+1$ -ий сегмент середовища $\mathcal{R}_{1,n+1,j}^*(p, z); j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{1,n+1,j}^*(p, z) = -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1 R_1) \prod_{s=2}^n \frac{-c_{1s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = 1 \\ \Delta'_{1,2j-1} \prod_{s=2}^{n-1} \frac{-c_{1s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = \overline{2, n-1}; \\ \Delta'_{1,2n-1} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = n \end{cases} \quad (4.34)$$

Вектор функції впливу неоднорідностей другої умови j - го інтерфейсу $\omega_{2,j}, j = \overline{1, n}$ на k -ий сегмент нанопористого середовища $\mathcal{R}_{2,k,j}^*(p, z); k = \overline{1, n+1}; j = \overline{1, n}$:

- впливу неоднорідностей другої умови j -го інтерфейсу $\omega_{2,j}$ на перший сегмент середовища $\mathcal{R}_{2,1,j}^*(p, z); j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{2_{1j}}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) A'_{1,1} & ; j = 1 \\ \prod_{s=2}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) A'_{1,2j-1} & ; j = \overline{2, n-1} \\ \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) \Delta_{\nu\alpha_{21}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = n \end{cases} \quad (4.35)$$

- впливу неоднорідностей другої умови j – го інтерфейсу $\omega_{2_j}, j = \overline{1, n}$ на k -ий сегмент середовища $\mathcal{R}_{2_{kj}}^*(p, z); k = \overline{2, n}; j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{2_{kj}}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1) \prod_{s=2}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{\nu\alpha_{12}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right) & ; j = 1 \\ \Delta_{1,2j-1} \prod_{s=j+1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right) & ; j = \overline{2, k-1} \\ A'_{1,2k-1} \left(\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j = k \\ A'_{1,2j-1} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j = \overline{k+1, n-1} \\ \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) \prod_{s=k}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j = n \end{cases} \quad (4.36)$$

- впливу неоднорідностей другої умови j – го інтерфейсу $\omega_{2_j}, j = \overline{1, n}$ на $n+1$ -ий сегмент середовища $\mathcal{R}_{2_{n+1,j}}^*(p, z); j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{2_{n+1,j}}^*(p, z) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1) \prod_{s=2}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = 1 \\ \Delta_{1,2j-1} \prod_{s=2}^{n-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = \overline{2, n-1} \\ \Delta_{1,2n-1} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = n \end{cases} \quad (4.37)$$

Перехід до оригіналів. Особливими точками головних розв'язків крайової задачі (4.14) - (4.16) $W_{n+1,k}^*(p, r), \mathcal{R}_{1_{kj}}^*(p, r), \mathcal{R}_{2_{kj}}^*(p, r), \mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,k_1}}^*(p, r, \rho)$ є точки галуження $p = \infty$ та

$$p_{1,2} = -\frac{1}{2} [S_1 \pm \sqrt{S_2}] < 0; S_1 = \beta_k(1 + \gamma_k) + \eta_k^2; S_2 = (\eta_k - \beta_k \gamma_k)^2 = \beta_k [\beta_k(1 + 2\gamma_k) + 2\eta_k^2] > 0. \quad (4.38)$$

Отже, при переході до оригіналів за Лапласом інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі [1, 3]:

$$\begin{aligned}
W_{n+1_k}(t, r) &= L^{-1} \left[W_{n+1_k}^*(p, r) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} W_{n+1_k}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} W_{n+1_k}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_{n+1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist} ds = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[W_{n+1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist} \right] ds; \\
R_{m_{kj}}(t, r) &= L^{-1} \left[\mathcal{R}_{m_{kj}}^*(p, r) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[\mathcal{R}_{m_{kj}}^*(is, r) \cdot e^{ist} \right] ds; m = \overline{1, 2}; \\
\mathcal{H}_{k, k_1}^*(t, r, \rho) &= L^{-1} \left[\mathcal{H}_{k, k_1}^*(p, r, \rho) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[\mathcal{H}_{k, k_1}^*(is, r, \rho) \cdot e^{ist} \right] ds.
\end{aligned} \tag{4.39}$$

На основі одержаних головних розв'язків задачі (4.15)-(4.17) та формул (4.41), отримуємо єдиний розв'язок вихідної крайової задачі (4.8)-(4.12):

$$\begin{aligned}
C_k(t, r) &= \int_0^t W_{n+1_k}(t-\tau, r) \cdot \omega_{R_{n+1}}(t) d\tau + \\
&+ \sum_{j=1}^n \int_0^t \left[\mathcal{R}_{1_{kj}}(t-\tau, r) \cdot \omega_{1_j}(\tau) + \mathcal{R}_{2_{kj}}(t-\tau, r) \cdot \omega_{2_j}(\tau) \right] d\tau + \\
&+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \mathcal{H}_{k, k_1}(t-\tau; r, \rho) \cdot \left[f_{k_1}(\tau, \rho) + C_{0_{k_1}}(\rho) \cdot \delta_+(\tau) \right] \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau + \\
&+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1}}{D_{z_{k_1}}} \mathcal{H}_{k, k_1}(t-\tau; r, \rho) e^{-\beta_{k_1} \cdot \gamma_{k_1} \cdot \tau} \cdot a_{0_{k_1}}(\rho) \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau;
\end{aligned} \tag{4.40}$$

$$a_k(t, r) = \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k (t-\tau)} \cdot C_k(\tau, r) d\tau + e^{-\beta_k \gamma_k t} \cdot a_{0_k}(r). \tag{4.41}$$

Тут

$$\begin{aligned}
\omega_{R_{n+1}}(t) &= L \left[\omega_{R_{n+1}}^*(p) \right] = \omega_{n+1}(t) + (\delta_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \gamma_{22}^{n+1}) C_{0_{n+1}}(r) \Big|_{r=R_0} \cdot \delta_+(t); \\
\omega_{mj} &= \left[(\delta_{m1}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{m1}^j) \cdot C_{0_j}(z) - (\delta_{m2}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{m2}^j) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j} \cdot \delta_+(t); m = \overline{1, 2}; j = \overline{1, n}.
\end{aligned}$$

Теорема доведена.

Рекурентні процедури обчислення визначника $\Delta_{\nu\alpha}^*(p)$ системи та визначників

$\Delta_{1, 2k-1}, \Delta'_{1, 2k-1}, \Delta_{1, 2k-1}, \Delta'_{1, 2k-1}$ подані в [5].

4.2. Методологія побудови розв'язків крайових задач адсорбції в обмежених неоднорідних циліндричних нанопористих середовищах із симетричною порожниною

Розглядається адсорбційний масоперенос в неоднорідному обмеженому циліндричному n - інтерфейсному по координаті r нанопористому середовищі, заповненому n адсорбентами з різними фізико-хімічними характеристиками. Математична модель такого переносу з урахуванням нестаціонарності масообміну на масообмінних поверхнях (крайових поверхнях і поверхнях контакту $r = R_{j-1}, j = \overline{1, n}$) та фізичних припущень поданих вище може бути описана у вигляді такої змішаної крайової задачі: побудувати обмежений в області

$$D_n = \left\{ (t, r) : t > 0, r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 > 0, R_{n+1} \leq \infty \right\} \quad \text{розв'язок системи}$$

диференціальних рівнянь в частинних похідних

$$\frac{\partial C_j(t, r)}{\partial t} + \frac{\partial a_j(t, r)}{\partial t} + \eta_j^2 C_j = D_{r_j} B_{v\alpha_j} [C_j] + f_j(t, r) \quad (4.42)$$

$$\frac{\partial a_j}{\partial t} = \beta_j (C_j - \gamma_j a_j) \quad (4.43)$$

за початковими умовами:

$$C_j(t, r)_{t=0} = C_{0_j}(r); a_j(t, r)_{t=0} = a_{0_j}(r); \quad (4.44)$$

крайовими умовами та системою інтерфейсних по координаті r :

$$\begin{aligned} [(\alpha_{12}^0 + \delta_{12}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{12}^0 + \gamma_{12}^0 \frac{\partial}{\partial t})] C_1(t, r) \Big|_{r=R_0} &= \omega_1(t); \\ [(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t})] C_{n+1}(t, r) \Big|_{r=R_{n+1}} &= \omega_{n+1}(t) \end{aligned} \quad ; \quad (4.45)$$

$$\left[[(\alpha_{i1}^j + \delta_{i1}^j \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{i1}^j + \gamma_{i1}^j \frac{\partial}{\partial t})] C_j(t, r) - [(\alpha_{i2}^j + \delta_{i2}^j \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{i2}^j + \gamma_{i2}^j \frac{\partial}{\partial t})] C_{j+1}(t, r) \right] \Big|_{r=R_j} = 0; \quad (4.46)$$

$j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}$

Методологія побудови аналітичного розв'язку моделі та рекурентні алгоритми обчислень матриць головних розв'язків(функцій впливу) системи. В припущенні, що шукані вектор – функції $C(t, r)$, $a(t, r)$ є оригіналами за Лапласом, застосуємо до крайової задачі (4.42)-(4.46) інтегральне перетворення Лапласа стосовно часової змінної t [3]. В результаті отримаємо крайову задачу:

побудувати обмежений на множині $I_n = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 > 0, R_{n+1} < \infty \right\}$ розв'язок системи диференціальних рівнянь Бесселя для модифікованих функцій:

$$\left[B_{\nu_{\alpha_j}} - q_j^2(p) \right] C_j^*(p, r) = -\mathcal{F}_j^*(p, r) \quad (4.47)$$

за крайовими умовами

$$\left[\bar{\alpha}_{12}^0 \frac{\partial}{\partial r} + \bar{\beta}_{12}^0 \right] C_1^*(p, r) \Big|_{r=R_0} = \omega_{R_0}^*(p); \left[\bar{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial r} + \bar{\beta}_{22}^{n+1} \right] C_{n+1}^*(p, r) \Big|_{r=R_{n+1}} = \omega_{R_{n+1}}^*(p); \quad (4.48)$$

та умовами інтерфейсу по координаті r :

$$\left[\left(\bar{\alpha}_{i1}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{i1}^j \right) C_j^*(p, r) - \left(\bar{\alpha}_{i2}^k \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{i2}^k \right) C_{j+1}^*(p, r) \right] \Big|_{r=R_j} = \omega_{ij}; j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}. \quad (4.49)$$

Тут $\mathcal{F}_j^*(p, r) = \frac{1}{D_{r_j}} [f_j^*(p, r) + C_{o_j}(r) + \frac{\beta_j \gamma_j}{p + \beta_j \gamma_j} a_{o_j}(r)];$

$$\omega_{R_0}^*(p) = \omega_1^*(p) + \left(\delta_{12}^0 \frac{d}{dr} + \gamma_{12}^0 \right) C_{0_1}(R_0) \equiv \omega_1^*(p) + \omega_{1,1};$$

$$\omega_{R_{n+1}}^*(p) = \omega_{n+1}^*(p) + \left(\delta_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \gamma_{22}^{n+1} \right) C_{0_{n+1}}(R_{n+1}) \equiv \omega_{n+1}^*(p) + \omega_{n+1,1};$$

$$\omega_{ij} = \left[\left(\delta_{i1}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i1}^j \right) C_{0_i}(r) - \left(\delta_{i2}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i2}^j \right) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j};$$

$$q_j^2(p) = \frac{1}{D_{r_j}(p + \beta_j \gamma_j)} \left[p^2 + p(\beta_j(1 + \gamma_j) + \beta_j \gamma_j \cdot \eta_j^2) \right];$$

$\bar{\alpha}_{im}^j = \alpha_{im}^j + \delta_{im}^j \cdot p; \bar{\beta}_{im}^j = \beta_{im}^j + \gamma_{im}^j \cdot p; j = \overline{1, n}; i, m = \overline{1, 2}$. Тут p – комплексно значний спектральний параметр інтегрального перетворення Лапласа, що присутній в крайових та умовах інтерфейсу (4.48), (4.49). При цьому

$$a_j^*(p, r) = \frac{a_{0_j}(r)}{p + \beta_j \gamma_j} + \frac{\beta_j(r)}{p + \beta_j \gamma_j} C_j^*(p, r); j = \overline{1, n+1}. \quad (4.50)$$

Зафіксувавши гілку дволистої функції $q_j(p)$, на якій $\text{Re } q_j(p) > 0$, внаслідок властивостей функцій які утворюють фундаментальну систему розв'язків рівняння Бесселя (4.47), розв'язок неоднорідної крайової задачі (4.47)-(4.49) будемо методом функцій Коші [11]:

$$C_j^*(p, r) = A_j \cdot I_{\nu_j \alpha_j}(q_j r) + B_j \cdot K_{\nu_j \alpha_j}(q_j r) + \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; j = \overline{1, n+1}; \quad (4.51)$$

де $\mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^*(p, r, \rho), j = \overline{1, n+1}$ - функції Коші:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} &= 0 \\ \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} &= -\rho^{-(2\alpha_j+1)} \end{aligned} \right\}. \quad (4.52)$$

Функції Коші $\mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^*(p, r, \rho), j = \overline{1, n+1}$ шукаємо у такому вигляді:

$$\mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^{-*} = D_{1_j} I_{\nu_j \alpha_j}(q_j r) + E_{1_j} K_{\nu_j \alpha_j}(q_j r); R_{j-1} < r < \rho < R_j \\ \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^{+*} = D_{2_j} I_{\nu_j \alpha_j}(q_j r) + E_{2_j} K_{\nu_j \alpha_j}(q_j r); R_{j-1} < \rho < r < R_j \end{cases}, \quad (4.53)$$

що задовольняють ще додаткові однорідні умови для :

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^{j-1} \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{12}^{j-1} \right) \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^{-*} \Big|_{r=R_{j-1}} = 0 \text{ (1-ша права умова } j\text{-1- го інтерфейсу – на межі } r = R_{j-1}), \quad (4.54)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{11}^j \right) \mathcal{E}_{\nu_j \alpha_j}^{+*} \Big|_{r=R_j} = 0 \text{ (2-га ліва умова } j\text{- го інтерфейсу – на межі } r = R_j). \quad (4.55)$$

Для визначення сталих $D_{1_k}, E_{1_k}, D_{2_k}, E_{2_k}$ функцій Коші $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho), k = \overline{1, n}$ внаслідок їх властивостей, що визначаються умовами (4.54), (4.55), отримаємо алгебраїчну систему рівнянь :

$$\begin{aligned} (D_{2_k} - D_{1_k}) I_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho) + (E_{2_k} - E_{1_k}) K_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho) &= 0; \\ (D_{2_k} - D_{1_k}) \left(\frac{\nu_k - \alpha_k}{\rho} I_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho) + R_k q_k^2 I_{\nu_k+1, \alpha_k+1}(q_k \rho) \right) + \\ + (E_{2_k} - E_{1_k}) \left(\frac{\nu_k - \alpha_k}{\rho} K_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho) - R_k q_k^2 K_{\nu_k+1, \alpha_k+1}(q_k \rho) \right) &= -\frac{1}{q_k \cdot \rho^{2\alpha_k+1}}; \\ D_{1_k} \cdot U_{\nu_{\alpha_{12}}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) + E_{1_k} \cdot U_{\nu_{\alpha_{12}}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) &= 0; \end{aligned} \quad (4.56)$$

$$D_{2_k} \cdot U_{\nu_{\alpha_{11}}}^{k1}(q_k R_k) + E_{2_k} \cdot U_{\nu_{\alpha_{11}}}^{k,2}(q_k R_k) = 0.$$

Із системи (4.71) знаходимо : $D_{2_k} - D_{1_k} = -q_k^{2\alpha_k} K_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho); E_{2_k} - E_{1_k} = q_k^{2\alpha_k} I_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho).$

Для визначення сталих $D_{1_{n+1}}, E_{1_{n+1}}, D_{2_{n+1}}, E_{2_{n+1}}$ функції Коші $\mathcal{E}_{n+1}^*(p, z, \xi)$ при $k = n+1$ в останньому рівнянні (4.56) замість величин

$U_{\nu\alpha_{11}}^{k,1}(q_k R_k), U_{\nu\alpha_{11}}^{k,2}(q_k R_k)$ стоятимуть величини $U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}), U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1})$.

В результаті однозначної розв'язності системи (4.56) функції Коші $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho); k = \overline{1, n+1}$ визначені і, внаслідок симетрії відносно діагоналі $r = \rho$, мають таку структуру:

$$\mathcal{E}_{\nu\alpha_k}^*(p, r, \rho) = \frac{q_k^{2\alpha_k}}{A_{\nu\alpha_{11}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k)} \begin{cases} \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r), R_{k-1} < r < \rho < R_k \\ \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho), R_{k-1} < \rho < r < R_k \end{cases}. \quad (4.57)$$

Тут

$$\Delta_{\nu\alpha_{im}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu\alpha_{k_2}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{k_{m1}}}^{k,2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{k_2}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{k_{m1}}}^{k,1}(q_k R_k) \quad (4.58)$$

$k = \overline{2, n}; i, m = \overline{1, 2}$

$$\Delta_{\nu\alpha_{i2}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) = U_{\nu\alpha_{i2}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) - U_{\nu\alpha_{i2}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1});$$

$i = \overline{1, 2}$.

При відомих функціях Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ крайові умови в точках $r = R_0$ і $r = R_{n+1}$ та умови інтерфейсу (4.48) для визначення невідомих коефіцієнтів $A_j, B_j, j = \overline{1, n+2}$, що беруть участь у структурах (4.51) загального розв'язку крайової задачі (4.56)-(4.58) $C_j^*(p, r)$, дають алгебраїчну систему із $2n+2$ - ох рівнянь:

$$\left. \begin{aligned} & U_{\nu\alpha_{12}}^{01}(q_1 R_0) A_1 + U_{\nu\alpha_{12}}^{02}(q_1 R_0) B_1 = \omega_{R_0}^* \\ & U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1) A_1 + U_{\nu\alpha_{11}}^{12}(q_1 R_1) B_1 - U_{\nu\alpha_{12}}^{11}(q_2 R_1) A_2 - U_{\nu\alpha_{12}}^{12}(q_2 R_1) B_2 = \omega_{l_1} \\ & U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1 R_1) A_1 + U_{\nu\alpha_{21}}^{12}(q_1 R_1) B_1 - U_{\nu\alpha_{22}}^{11}(q_2 R_1) A_2 - U_{\nu\alpha_{22}}^{12}(q_2 R_1) B_2 = \omega_{2_1} + G_1^* \\ & \text{-----} \\ & U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) A_k + U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) B_k - U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1} R_k) A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k2}(q_{k+1} R_k) B_{k+1} = \omega_{l_k} \\ & U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}(q_k R_k) A_k + U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) B_k - U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1} R_k) A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1} R_k) B_{k+1} = \omega_{2_k} + G_k^* \\ & \text{-----} \\ & U_{\nu\alpha_{11}}^{n,1}(q_n R_n) A_n + U_{\nu\alpha_{11}}^{n,2}(q_n R_n) B_n - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) A_{n+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) B_{n+1} = \omega_{l_n} \\ & U_{\nu\alpha_{21}}^{n,1}(q_n R_n) A_n + U_{\nu\alpha_{21}}^{n,2}(q_n R_n) B_n - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) A_{n+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) B_{n+1} = \omega_{2_n} + G_n^* \\ & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}) A_{n+1} + U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) B_{n+1} = \omega_{R_{n+1}}^*(p) \end{aligned} \right\} \therefore \quad (4.59)$$

Тут G_j^* вирази, що містять інтеграли від функцій Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ в (4.59):

$$G_j^* = \frac{c_{1_j}}{R_j^{2\alpha_j+1}} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_j R_{j-1}, q_j R_{j-1})} \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho - \frac{c_{2_j}}{R_j^{2\alpha_{j+1}+1}} \int_{R_j}^{R_{j+1}} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{j+1}(q_{j+1} R_{j+1}, q_{j+1} \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{22}}(q_{j+1} R_j, q_{j+1} R_{j+1})} \mathcal{F}_{j+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{j+1}+1} d\rho, \\ j = \overline{1, n}$$

$$\text{Тут } c_{j_k} = \bar{\alpha}_{2_j}^k \cdot \bar{\beta}_{1_j}^k - \bar{\alpha}_{1_j}^k \cdot \bar{\beta}_{2_j}^k; k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2}; s = \begin{cases} 1 & ; k = \overline{1, n} \\ 2 & ; k = n+1 \end{cases}$$

$$-\frac{c_{1_k}}{q_k^{2\alpha_k} \cdot R_k^{2\alpha_k+1}} = U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_k R_k); k = \overline{1, n};$$

$$-\frac{c_{2_k}}{q_{k+1}^{2\alpha_{k+1}} \cdot R_{k+1}^{2\alpha_{k+1}+1}} = U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1} R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1} R_k) - U_{\nu\alpha_{12}}^{k2}(q_{k+1} R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1} R_k); k = \overline{1, n};$$

Припустимо, що виконана умова однозначної однозначної розв'язності крайової задачі (4.47)-(4.49), тобто визначник алгебраїчної системи (4.59) відмінним від нуля:

$$\Delta_{\nu\alpha}^*(p) = \Delta_{\overline{1, 2n}} \cdot \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \\ U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}) & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) \end{vmatrix} - \Delta'_{\overline{1, 2n}} \cdot \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \\ U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}) & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) \end{vmatrix} \neq 0. \quad (4.60)$$

У результаті підстановки одержаних значень $A_k, B_k, D_{1_k}, D_{2_k}, E_{1_k}, E_{2_k}, k = \overline{1, n+1}$ в (4.64) та після низки перетворень шляхом розкриття визначників $\Delta_{A_k}^* I_{\nu_k \alpha_k}(q_k r) + \Delta_{B_k}^* K_{\nu_k \alpha_k}(q_k r), k = \overline{1, n+1}$, отримуємо рекурентні вирази для обчислення компонентів $C_k^*(p, r)$ вектор-функції $C^*(p, r)$ - розв'язку крайової задачі (4.56)-(4.58):

$$C_k^*(p, r) = W_{k_1}^*(p, r) \cdot \omega_{R_0}^*(p) + W_{k_{n+1}}^*(p, r) \cdot \omega_{R_{n+1}}^*(p) + \sum_{j=1}^n \left[\mathcal{R}_{1_{k,j}}^*(p, r) \cdot \omega_{1_j} + \mathcal{R}_{2_{k,j}}^*(p, r) \cdot \omega_{2_j} \right] + \\ + \sum_{j=1}^{n+1} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho) \cdot \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; k = \overline{1, n+1} \quad (4.61)$$

Головні розв'язки крайової задачі (4.47)-(4.49) є такими:

Вектор функцій впливу лівої крайової умови $\omega_{R_0}^*(p)$ на k -тий сегмент нанопористого середовища $W_{k_1}^*(p, r)$:

$$W_{k_1}^*(p, r) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 R_1, q_1 r) \Delta'_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 R_1, q_1 r) \Delta_{1,2} \right] & ; k=1 \\ \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^{k-1}(q_k R_k, q_k r) \cdot \Delta'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k} \right] & ; k = \overline{1, n} \\ -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \Phi_{\nu\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) \cdot & k = n+1 \end{cases} \quad (4.62)$$

Вектор функції впливу правої крайової умови $\omega_{R_{n+1}}^*(p)$ на k -тий сегмент середовища $W_{n+1k}^*(p, r)$:

$$W_{k_{n+1}}^*(p, z) = \begin{cases} -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) & ; k=1 \\ -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta'_{1,2k-2} \right] & ; k = \overline{1, n} \\ \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{12}}^n(q_{n+1} r, q_{n+1} R_n) \cdot A'_{1,2n} - \Phi_{22}^n(q_{n+1} r, q_{n+1} R_n) \cdot A_{1,2n} \right] \cdot & k = n+1 \end{cases} \quad (4.63)$$

Матриця функції впливу j -го джерела $\mathcal{F}_j^*(p, \rho)$ на k -тий сегмент середовища $[\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho)]$:

впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) на перший сегмент середовища:

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{11}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A'_{1,2} \right], R_0 < \rho < r < R_1; \\ \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A'_{1,2} \right], R_0 < r < \rho < R_1 \end{cases};$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho) = \frac{q_j^{2\alpha_j} \cdot \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A_{1,2j} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A'_{1,2j} \right]; \quad (4.64)$$

$j = \overline{2, n}$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{1,n+1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \cdot \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1});$$

впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) на k -й сегмент ($k = \overline{2, n}$) середовища:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k1}}^*(p, r, \rho) &= -\frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \cdot \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A'_{\overline{1,2k}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{\overline{1,2k}} \right] \cdot \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) &= -\frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^{k-1} \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{\overline{1,2k}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{\overline{1,2k}} \right] \cdot ; \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{\overline{1,2j-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta'_{\overline{1,2j-2}} \right]; j = \overline{2, k-1}; k = \overline{2, n} \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) &= -\frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-2}} \right] \cdot ; \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) \cdot A'_{\overline{1,2j}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) \cdot A_{\overline{1,2j}} \right]; j = \overline{k+1, n}; k = \overline{2, n} \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kk}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta'_{\overline{1,2k-2}} \right] \cdot \right. \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta'_{\overline{1,2k-2}} \right] \cdot ; \quad (4.65) \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A'_{\overline{1,2k}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{\overline{1,2k}} \right], R_{k-1} < \rho < r < R_k \\
&\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot A'_{\overline{1,2k}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot A_{\overline{1,2k}} \right], R_{k-1} < r < \rho < R_k \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,n+1}}^*(p, r, \rho) &= -\frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=k}^n \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{\overline{1,2k-2}} \right];
\end{aligned}$$

впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) джерела на $n+1$ -ий сегмент середовища:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,l}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}); \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,j}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^n \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta'_{\overline{1,2j-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{\overline{1,2j-2}} \right]; \quad (4.66) \\
j &= \overline{2, n}
\end{aligned}$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,n+1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{\nu\alpha_{12}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta'_{\overline{1,2n}} - \Phi_{\nu\alpha_{22}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta_{\overline{1,2n}} \right], R_n < \rho < r < R_{n+1} \right. ; \\
\left. \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{\nu\alpha_{12}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta'_{\overline{1,2n}} - \Phi_{\nu\alpha_{22}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta_{\overline{1,2n}} \right], R_n < r < \rho < R_{n+1} \right\};$$

Матриця функцій впливу неоднорідностей першої умови j -го інтерфейсу $\omega_{1,j}$, $j = \overline{1, n}$ на k -тий сегмент середовища $\mathcal{R}_{1_{k,j}}^*(p, z)$; $k = \overline{1, n+1}$; $j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{1_{kj}}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A_{\overline{1,2}} & ; j = 1 \\ \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A_{\overline{1,2j}} & ; j = \overline{2, n-1}; \\ \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j = n \end{cases} \quad (4.67)$$

$$\mathcal{R}_{i_{ij}}^*(p, r) = -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_1 R_0, q_1 R_1) \prod_{s=2}^{k-1} \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot (\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k}) & ; j=1 \\ \Delta'_{1,2j} \prod_{s=j+1}^{k-1} \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot (\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k}) & ; j=\overline{2, k-1} \\ A_{1,2k} \left(\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right) & ; j=k \\ A_{1,2j} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot (\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2}) & ; j=\overline{k+1, n-1} \\ -\Delta_{\nu\alpha_{22}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) \prod_{s=k}^{n-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot (\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2}) & ; j=n \end{cases} ; \quad (4.68)$$

$$\mathcal{R}_{i_{n+1,j}}^*(p, z) = -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_1 R_0, q_1 R_1) \prod_{s=2}^n \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j=1 \\ \Delta'_{1,2j} \prod_{s=2}^{n-1} \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j=\overline{2, n-1}; \\ \Delta'_{1,2n} \cdot \Phi_{\nu\alpha_{22}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j=n \end{cases} \quad (4.69)$$

Матриці функції впливу неоднорідностей другої умови j – го інтерфейсу $\omega_{2_j}, j = \overline{1, n}$ на κ – тий сегмент середовища $\mathcal{R}_{2_{\kappa,j}}^*(p, z); \kappa = \overline{1, n+1}; j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{2_{1j}}^*(p, r) = -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A'_{1,2} & ; j=1 \\ \prod_{s=12}^{j-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A'_{1,2j} & ; j=\overline{2, n-1} \\ \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \Delta_{\nu\alpha_{21}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j=n \end{cases} \quad (4.70)$$

$$\mathcal{R}_{2_{ij}}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_1 R_0, q_1 R_1) \prod_{s=2}^{k-1} \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot (\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k}) & ; j=1 \\ \Delta_{1,2j} \prod_{s=j+1}^{k-1} \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot (\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k}) & ; j=\overline{2, k-1} \\ A'_{1,2k} \left(\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right) & ; j=k \\ A'_{1,2j} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot (\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2}) & ; j=\overline{k+1, n-1} \\ \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) \prod_{s=k}^{n-1} \frac{-C_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot (\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2}) & ; j=n \end{cases} ; \quad (4.71)$$

$$\mathcal{R}_{2_{n+1,j}}^*(p, z) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_1 R_0, q_1 R_1) \prod_{s=2}^n \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j=1 \\ \Delta_{1,2j} \prod_{s=2}^{n-1} \frac{-C_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j=\overline{2, n-1}; \\ \Delta_{1,2n} \cdot \Phi_{22}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j=n \end{cases} \quad (4.72)$$

Перехід до оригіналів. Особливими точками головних розв'язків крайової задачі (4.47) - (4.49) $W_{1_k}^*(p, r)$, $W_{n+1_k}^*(p, r)$, $\mathcal{R}_{1_{kj}}^*(p, r)$, $\mathcal{R}_{2_{kj}}^*(p, r)$, $\mathcal{H}_{\alpha_{k,k_1}}^*(p, r, \rho)$ є точки галуження $p = \infty$ та $p_{1,2} = -\frac{1}{2}[S_1 \pm \sqrt{S_2}] < 0$;

$$S_1 = \beta_k(1 + \gamma_k) + \eta_k^2; S_2 = (\eta_k - \beta_k \gamma_k)^2 = \beta_k [\beta_k(1 + 2\gamma_k) + 2\eta_k^2] > 0. \quad (4.73)$$

Отже, при переході до оригіналів за Лапласом інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі [2, 3]:

$$\begin{aligned} W_{1_k}(t, r) &= L^{-1} [W_{1_k}^*(p, r)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} W_{1_k}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} W_{1_k}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_{1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist} ds = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} [W_{1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist}] ds; \\ W_{n+1_k}(t, r) &= L^{-1} [W_{n+1_k}^*(p, r)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} [W_{n+1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist}] ds; \\ R_{m_{kj}}(t, r) &= L^{-1} [\mathcal{R}_{m_{kj}}^*(p, r)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} [\mathcal{R}_{m_{kj}}^*(is, r) \cdot e^{ist}] ds, m = \overline{1, 2}; \\ \mathcal{H}_{k,k_1}^*(t, r, \rho) &= L^{-1} [\mathcal{H}_{k,k_1}^*(p, r, \rho)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} [\mathcal{H}_{k,k_1}^*(is, r, \rho) \cdot e^{ist}] ds. \end{aligned} \quad (4.74)$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (4.59), з врахуванням одержаних головних розв'язків задачі (4.47)-(4.49) та формул (4.74), отримуємо єдиний розв'язок вихідної крайової задачі (4.42)-(4.46):

$$\begin{aligned} C_k(t, r) &= \int_0^t W_{1_k}(t - \tau, r) \cdot \omega_{R_0}(t) d\tau + \int_0^t W_{n+1_k}(t - \tau, r) \cdot \omega_{R_{n+1}}(t) d\tau + \\ &+ \sum_{j=1}^n \int_0^t [\mathcal{R}_{1_{kj}}(t - \tau, r) \cdot \omega_{1_j}(\tau) + \mathcal{R}_{2_{kj}}(t - \tau, r) \cdot \omega_{2_j}(\tau)] d\tau + \\ &+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \mathcal{H}_{k,k_1}(t - \tau; r, \rho) \cdot [f_{k_1}(\tau, \rho) + C_{0_{k_1}}(\rho) \cdot \delta_+(\tau)] \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau + \\ &+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1}}{D_{z_{k_1}}} \mathcal{H}_{k,k_1}(t - \tau; r, \rho) \cdot e^{-\beta_{k_1} \cdot \gamma_{k_1} \cdot \tau} \cdot a_{0_{k_1}}(\rho) \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau; \end{aligned} \quad (4.75)$$

$$a_k(t, z) = \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k (t-\tau)} \cdot C_k(\tau, z) d\tau + e^{-\beta_k \gamma_k t} \cdot a_{0_k}(z). \quad (4.76)$$

Тут

$$\omega_1(t) = L[\omega_1^*(p)] = \omega_0(t) + (\delta_{11}^0 \frac{d}{dz} + \gamma_{11}^0) C_{0_1}(r) \Big|_{r=R_0} \cdot \delta_+(t);$$

$$\omega_{l_{n+1}}(t) = L[\omega_{l_{n+1}}^*(p)] = \omega_{n+1}(t) + (\delta_{22}^{n+1} \frac{d}{dz} + \gamma_{22}^{n+1}) C_{0_{n+1}}(r) \Big|_{r=R_0} \cdot \delta_+(t);$$

$$\omega_{mj} = \left[(\delta_{m1}^j \frac{d}{dz} + \gamma_{m1}^j) \cdot C_{0_j}(z) - (\delta_{m2}^j \frac{d}{dz} + \gamma_{m2}^j) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j} \cdot \delta_+(t); m = \overline{1, 2}; j = \overline{1, n}.$$

Викладене вище дає підстави сформулювати наступну теорему.

Теорема 4.2.1 (про розв'язність): Якщо виконується умова однозначної розв'язності змішаної крайової задачі і задані та шукані функції є оригіналами за Лапласом то розв'язок змішаної крайової задачі (4.42)-(4.46) існує і єдиний та визначається формулами (4.75), (4.76).

4.3. Методологія побудови розв'язків крайових задач адсорбції в необмежених неоднорідних циліндричних нанопористих середовищах

Розглядається адсорбційний масоперенос в неоднорідному необмеженому циліндричному n - інтерфейсному по радіальній координаті r нанопористому середовищі, заповненому n круговими шарами адсорбентів різної пористої структури. Математична модель такого переносу з урахуванням швидкостей зміни градієнтів визначальних параметрів переносу на масообмінних поверхнях (крайових поверхнях і поверхнях інтерфейсу $r = R_{j-1}, j = \overline{1, n}$) та фізичних припущень поданих вище може бути описана у вигляді такої змішаної крайової задачі:

$$D_n = \left\{ (t, r) : t > 0, r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 = 0, R_{n+1} = \infty \right\} \quad \text{розв'язок системи}$$

диференціальних рівнянь в частинних похідних

$$\frac{\partial C_j(t, r)}{\partial t} + \frac{\partial a_j(t, r)}{\partial t} + \eta_j^2 C_j = D_{r_j} B_{v\alpha_j} [C_j] + f_j(t, r) \quad (4.77)$$

$$\frac{\partial a_j}{\partial t} = \beta_j (C_j - \gamma_j a_j) \quad (4.78)$$

за початковими умовами:

$$C_j(t, r)_{t=0} = C_{0_j}(r); a_j(t, r)_{t=0} = a_{0_j}(r); \quad (4.79)$$

крайовими умовами та системою умов інтерфейсу по координаті r :

$$\lim_{r \rightarrow R_0} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^{\alpha_0 - \nu_0} C_1(t, r) \right] = 0; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^{\alpha_{n+1} - \nu_{n+1}} C_{n+1}(t, r) \right] = 0; \quad (4.80)$$

$$\left[\left[(\alpha_{i1}^j + \delta_{i1}^j \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{i1}^j + \gamma_{i1}^j \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_j(t, r) - \left[(\alpha_{i2}^j + \delta_{i2}^j \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{i2}^j + \gamma_{i2}^j \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_{j+1}(t, r) \right] \Big|_{r=R_j} = 0; \quad (4.81)$$

$j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}$

В припущені, що шукані вектор – функції $C(t, r), a(t, r)$ є оригіналами за Лапласом, застосуємо до крайової задачі (4.77)-(4.81) інтегральне перетворення Лапласа стосовно часової змінної t [3]. В результаті отримаємо крайову задачу:

побудувати обмежений на множині $I_n = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 = 0, R_{n+1} = \infty \right\}$

розв'язок системи диференціальних рівнянь Бесселя для модифікованих функцій:

$$\left[B_{\nu \alpha_j} - q_j^2(p) \right] C_j^*(p, r) = -\mathcal{F}_j^*(p, r) \quad (4.82)$$

за крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^{\alpha_0 - \nu_0} C_1^*(p, r) \right] = 0; \quad \lim_{r \rightarrow \infty} \left[\frac{\partial}{\partial r} r^{\alpha_{n+1} - \nu_{n+1}} C_{n+1}^*(p, r) \right] = 0 \quad (4.83)$$

і системою інтерфейсних умов :

$$\left[\left[(\bar{\alpha}_{i1}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{i1}^j) \right] C_j^*(p, r) - \left[(\bar{\alpha}_{i2}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{i2}^j) \right] C_{j+1}^*(p, r) \right] \Big|_{r=R_j} = \omega_{ij}; \quad j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}. \quad (4.84)$$

Тут $\mathcal{F}_j^*(p, r) = \frac{1}{D_{r_j}} [f_j^*(p, r) + C_{o_j}(r) + \frac{\beta_j \gamma_j}{p + \beta_j \gamma_j} a_{0_j}(r)]$;

$$\omega_{R_{n+1}}^*(p) = \omega_{n+1}^*(p) + \left(\delta_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \gamma_{22}^{n+1} \right) C_{0_{n+1}}(R_{n+1}) \equiv \omega_{n+1}^*(p) + \omega_{n+1,1};$$

$$\omega_{ij} = \left[\left(\delta_{i1}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i1}^j \right) C_{0_i}(r) - \left(\delta_{i2}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i2}^j \right) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j};$$

$$q_j^2(p) = \frac{1}{D_{r_j} (p + \beta_j \gamma_j)} \left[p^2 + p (\beta_j (1 + \gamma_j) + \beta_j \gamma_j \cdot \eta_j^2) \right];$$

$$\bar{\alpha}_{im}^j = \alpha_{im}^j + \delta_{im}^j \cdot p; \bar{\beta}_{im}^j = \beta_{im}^j + \gamma_{im}^j \cdot p; \quad j = \overline{1, n}; i, m = \overline{1, 2}.$$

При цьому

$$a_j^*(p, r) = \frac{a_{0j}(r)}{p + \beta_j \gamma_j} + \frac{\beta_j}{p + \beta_j \gamma_j} C_j^*(p, r); j = \overline{1, n+1}. \quad (4.85)$$

Зафіксувавши гілку дволісної функції $q_j(p)$, на якій $\operatorname{Re} q_j(p) > 0$, внаслідок властивостей функцій які утворюють фундаментальну систему розв'язків рівняння Бесселя (4.112), розв'язок неоднорідної крайової задачі (4.82)-(4.84) будемо методом функцій Коші [11] :

$$C_1^*(p, r) = A_1 \cdot I_{\nu_{\alpha_1}}(q_1 r) + \int_0^{R_1} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_1}}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_1^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_1+1} d\rho;$$

$$C_j^*(p, r) = A_j \cdot I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + B_j \cdot K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; j = \overline{2, n}; \quad (4.86)$$

$$C_{n+1}^*(p, r) = B_{n+1} \cdot K_{\nu_{\alpha_{n+1}}}(q_{n+1} r) + \int_{R_n}^{\infty} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_{n+1}}}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_{n+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{n+1}+1} d\rho;$$

де $\mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho)$, $j = \overline{1, n+1}$ - функції Коші:

$$\begin{cases} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} = 0; \\ \left(\frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} \right) = -\rho^{-(2\alpha_j+1)}. \end{cases} \quad (4.87)$$

Функції Коші $\mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho)$ будемо в наступному вигляді :

$$\mathcal{E}_{\nu_{\alpha_1}}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_1}}^{-*} = D_{1_1} I_{\nu_{\alpha_1}}(q_1 r); 0 < r < \rho < R_1 \\ \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_1}}^{+*} = D_{2_1} I_{\nu_{\alpha_1}}(q_1 r) + E_{2_1} K_{\nu_{\alpha_1}}(q_1 r); 0 < \rho < r < R_1 \end{cases}$$

$$\mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^{-*} = D_{1_j} I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + E_{1_j} K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r); R_{j-1} < r < \rho < R_j \\ \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^{+*} = D_{2_j} I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + E_{2_j} K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r); R_{j-1} < \rho < r < R_j \end{cases}; j = \overline{2, n}, \quad (4.88)$$

$$\mathcal{E}_{\nu_{\alpha_{n+1}}}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_{n+1}}}^{-*} = D_{1_{n+1}} I_{\nu_{\alpha_{n+1}}}(q_{n+1} r) + E_{1_{n+1}} K_{\nu_{\alpha_{n+1}}}(q_{n+1} r); R_n < r < \rho < \infty \\ \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_{n+1}}}^{+*} = E_{2_{n+1}} K_{\nu_{\alpha_{n+1}}}(q_{n+1} r); R_n < \rho < r < \infty \end{cases};$$

що задовольняють ще додаткові однорідні умови для $j = \overline{2, n}$:

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^{j-1} \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{12}^{j-1} \right) \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^* \Big|_{r=R_{j-1}} = 0 \text{ (перша права умова } j\text{-}I\text{-го інтерфейсу – на межі } r=R_{j-1}) \quad (4.89)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{ss}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{ss}^j \right) \mathcal{E}_{v\alpha_j}^{+*} \Big|_{r=l_j} = 0 \text{ (перша ліва умова } j \text{ - го інтерфейсу : на межі } r = R_j,) \quad (4.90)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^1 \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{11}^1 \right) \mathcal{E}_{v\alpha_1}^{+*} \Big|_{r=R_1} = 0 \text{ (перша ліва умова } 1\text{- го інтерфейсу – на межі } r = R_1), \quad (4.91)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^n \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{12}^n \right) \mathcal{E}_{v\alpha_{n+1}}^{+*} \Big|_{r=R_n} = 0 \text{ (перша права умова } n\text{- го інтерфейсу – на межі } r = R_n). \quad (4.92)$$

Для визначення сталих $D_{1_1}, D_{2_1}, E_{2_1}$ функцій Коші $\mathcal{E}_1^*(p, r, \rho)$ внаслідок їх властивостей, що визначаються додатковою умовою (4.91), отримаємо алгебраїчну систему рівнянь:

$$\begin{aligned} (D_{2_1} - D_{1_1}) I_{v_1\alpha_1}(q_1\rho) + E_{2_1} K_{v_1\alpha_1}(q_1\rho) &= 0; \\ (D_{2_1} - D_{1_1}) \left(\frac{v_1 - \alpha_1}{\rho} I_{v_1\alpha_1}(q_1\rho) + R_1 q_1^2 I_{v_1+1, \alpha_1+1}(q_1\rho) \right) + \\ + E_{2_1} \left(\frac{v_1 - \alpha_1}{\rho} K_{v_1\alpha_1}(q_1\rho) - R_1 q_1^2 K_{v_1+1, \alpha_1+1}(q_1\rho) \right) &= -\frac{1}{q_1 \cdot \rho^{2\alpha_1+1}} \end{aligned} \quad (4.93)$$

$$D_{2_1} \cdot U_{v\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1) + E_{2_1} \cdot U_{v\alpha_{11}}^{1,2}(q_1 R_1) = 0.$$

Для визначення сталих $D_{1_k}, E_{1_k}, D_{2_k}, E_{2_k}$ функцій Коші $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho), k = \overline{2, n+1}$ внаслідок їх властивостей, що визначаються додатковими умовами (4.89), (4.90), отримаємо дві алгебраїчні системи рівнянь :

$$\left. \begin{aligned} (D_{2_k} - D_{1_k}) I_{v_k\alpha_k}(q_k\rho) + (E_{2_k} - E_{1_k}) K_{v_k\alpha_k}(q_k\rho) &= 0 \\ (D_{2_k} - D_{1_k}) \left(\frac{v_k - \alpha_k}{\rho} I_{v_k\alpha_k}(q_k\rho) + R_k q_k^2 I_{v_k+1, \alpha_k+1}(q_k\rho) \right) + \\ + (E_{2_k} - E_{1_k}) \left(\frac{v_k - \alpha_k}{\rho} K_{v_k\alpha_k}(q_k\rho) - R_k q_k^2 K_{v_k+1, \alpha_k+1}(q_k\rho) \right) &= -\frac{1}{q_k \cdot \rho^{2\alpha_k+1}} \\ D_{1_k} \cdot U_{v\alpha_{12}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) + E_{1_k} \cdot U_{v\alpha_{12}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) &= 0 \\ D_{2_k} \cdot U_{v\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) + E_{2_k} \cdot U_{v\alpha_{11}}^{k,2}(q_k R_k) &= 0 \end{aligned} \right\} . \quad (4.94)$$

$$\left. \begin{aligned} & -D_{l_{n+1}} \cdot I_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) + (E_{2_{n+1}} - E_{1_{n+1}})K_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) = 0 \\ & -D_{l_{n+1}} \cdot \left(\frac{\nu_{n+1} - \alpha_{n+1}}{\rho} I_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) + \rho q_{n+1}^2 I_{\nu_{n+1}+1, \alpha_{n+1}+1}(q_{n+1}\rho) \right) + \\ & + (E_{2_{n+1}} - E_{1_{n+1}}) \left(\frac{\nu_{n+1} - \alpha_{n+1}}{\rho} K_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) - \rho q_{n+1}^2 K_{\nu_{n+1}+1, \alpha_{n+1}+1}(q_{n+1}\rho) \right) = -\frac{1}{q_{n+1} \cdot \rho^{2\alpha_k+1}} \\ & D_{l_{n+1}} \cdot U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_{n+1}R_n) + E_{l_{n+1}} \cdot U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1}R_n) = 0 \end{aligned} \right\} \cdot (4.95)$$

В результаті однозначної розв'язності алгебраїчних систем (4.93)-(4.95) функції Коші $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho)$ є визначені і внаслідок симетрії відносно діагоналі $r = \rho$ мають таку структуру:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\nu\alpha_l}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_l^{2\alpha_l}}{U_{\nu\alpha_{ll}}^{ll}(q_l R_l)} \left\{ \begin{aligned} & I_{\nu\alpha_l}(q_l r) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{ll}}^l(q_l R_l, q_l \rho), 0 < r < \rho < R_l; \\ & I_{\nu\alpha_l}(q_l \rho) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{ll}}^l(q_l R_l, q_l r), 0 < \rho < r < R_l \end{aligned} \right\}; \\ \mathcal{E}_{\nu\alpha_k}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_k^{2\alpha_k}}{A_{\nu\alpha_{ll}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k)} \left\{ \begin{aligned} & \Phi_{\nu\alpha_{ll}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{l2}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r), R_{k-1} < r < \rho < R_k; \\ & \Phi_{\nu\alpha_{ll}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{l2}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho), R_{k-1} < \rho < r < R_k \end{aligned} \right\}; \\ k &= \overline{2, n} \\ \mathcal{E}_{\nu\alpha_{n+1}}^*(p, r, \rho) &= -\frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{U_{\nu\alpha_{l2}}^{n,2}(q_{n+1}R_n, q_{n+1}R_n)} \left\{ \begin{aligned} & K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{l2}}^n(q_{n+1}R_n, q_{n+1}r), R_n < r < \rho < \infty \\ & K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1}r) \cdot \Phi_{\nu\alpha_{l2}}^n(q_{n+1}R_{n+1}, q_{n+1}\rho), R_n < \rho < r < \infty \end{aligned} \right\}. \quad (4.96) \end{aligned}$$

Тут

$$\Delta_{\nu\alpha_{im}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu\alpha_{ki2}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{km1}}^{k,2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{ki2}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{km1}}^{k,1}(q_k R_k);$$

$$k = \overline{2, n+1}; i, m = \overline{1, 2}$$

$$\Delta_{\nu\alpha_{1i}}(q_{n+1}R_n, q_{n+1}R_{n+1}) = U_{\nu\alpha_{n+12}}^{n,1}(q_{n+1}R_n) U_{\nu\alpha_{n+122}}^{n+1,2}(q_{n+1}R_{n+1}) - U_{\nu\alpha_{n+12}}^{n,2}(q_{n+1}R_n) U_{\nu\alpha_{n+122}}^{n+1,1}(q_{n+1}R_{n+1});$$

$$i = \overline{1, 2}.$$

При відомих функціях Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ крайові умови в точках $r = R_0$ і $r = R_{n+1}$ та умови інтерфейсу (4.83) для визначення невідомих коефіцієнтів $A_j, B_j, C_j, D_j, j = \overline{2, n}$, що беруть участь у структурах (4.86) загального розв'язку крайової задачі (4.82)-(4.84) $C_j^*(p, r)$, дають алгебраїчну систему із $2n$ -рівнянь:

$$\left. \begin{aligned}
& U_{\nu\alpha_{12}}^{11}(q_1 R_1) A_1 - U_{\nu\alpha_{12}}^{11}(q_2 R_1) A_2 - U_{\nu\alpha_{12}}^{12}(q_2 R_1) B_2 = \omega_{1_1} \\
& U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1 R_1) A_1 + U_{\nu\alpha_{21}}^{12}(q_1 R_1) B_1 - U_{\nu\alpha_{22}}^{11}(q_2 R_1) A_2 - U_{\nu\alpha_{22}}^{12}(q_2 R_1) B_2 = \omega_{2_1} + G_1^* \\
& \text{-----} \\
& U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) A_k + U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) B_k - U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1} R_k) A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k2}(q_{k+1} R_k) B_{k+1} = \omega_{1_k} \\
& U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}(q_k R_k) A_k + U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) B_k - U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1} R_k) A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1} R_k) B_{k+1} = \omega_{2_k} + G_k^* \\
& U_{\nu\alpha_{11}}^{k+1,1}(q_{k+1} R_{k+1}) A_{k+1} + U_{\nu\alpha_{11}}^{k+1,2}(q_{k+1} R_{k+1}) B_{k+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k+1,1}(q_{k+2} R_{k+1}) A_{k+2} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k+1,2}(q_{k+2} R_{k+1}) B_{k+2} = \omega_{1_{k+1}} \\
& U_{\nu\alpha_{21}}^{k+1,1}(q_{k+1} R_{k+1}) A_{k+1} + U_{\nu\alpha_{21}}^{k+1,2}(q_{k+1} R_{k+1}) B_{k+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k+1,1}(q_{k+2} R_{k+1}) A_{k+2} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k+1,2}(q_{k+2} R_{k+1}) B_{k+2} = \omega_{2_{k+1}} + G_{k+1}^* \\
& \text{-----} \\
& U_{\nu\alpha_{11}}^{n,1}(q_n R_n)(q_n l_n) A_n + U_{\nu\alpha_{11}}^{n,2}(q_n R_n) B_n - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) B_{n+1} = \omega_{1_n} \\
& U_{\nu\alpha_{21}}^{n,1}(q_n R_n) A_n + U_{\nu\alpha_{21}}^{n,2}(q_n R_n) B_n - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) B_{n+1} = \omega_{2_n} + G_n^*
\end{aligned} \right\} \quad (4.97)$$

Тут G_j^* вирази, що містять інтеграли від функцій Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ в (4.97) та обчислюються за формулою :

$$G_j^* = \int_{R_k}^{R_{k+1}} \left(\bar{\alpha}_{22}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{22}^j \right) \mathcal{E}_{\nu\alpha_{j+1}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=R_j} \mathcal{F}_{j+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{j+1}+1} d\rho - \int_{R_{j-1}}^{R_j} \left(\bar{\alpha}_{21}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{21}^j \right) \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^{+*}(p, r, \rho) \Big|_{r=R_j} \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho;$$

$j = \overline{1, n}$

і мають вигляд :

$$\begin{aligned}
G_1^* &= \frac{c_{1_1}}{R_1^{2\alpha_1+1}} \int_0^{R_1} \frac{I_{\nu\alpha_1}(q_1 \rho)}{U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1)} \mathcal{F}_1^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_1+1} d\rho - \frac{c_{2_1}}{R_1^{2\alpha_2+1}} \int_{R_1}^{R_2} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{11}}^2(q_2 R_2, q_2 \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_2 R_1, q_2 R_2)} \mathcal{F}_2^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_2+1} d\rho \\
G_j^* &= \frac{c_{1_j}}{R_j^{2\alpha_j+1}} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_j R_{j-1}, q_j R_j)} \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho - \frac{c_{2_j}}{R_j^{2\alpha_{j+1}+1}} \int_{R_j}^{R_{j+1}} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{11}}^{j+1}(q_{j+1} R_{j+1}, q_{j+1} \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{j+1} R_j, q_{j+1} R_{j+1})} \mathcal{F}_{j+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{j+1}+1} d\rho, \quad j = \overline{1, n-1} \\
G_n^* &= \frac{c_{1_n}}{R_n^{2\alpha_n+1}} \int_{R_{n-1}}^{R_n} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{n-1}(q_n R_{n-1}, q_n \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_n R_{n-1}, q_n R_{n-1})} \mathcal{F}_n^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_n+1} d\rho - \frac{c_{2_n}}{R_n^{2\alpha_{n+1}+1}} \int_{R_n}^{R_{n+1}} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} R_{n+1}, q_{n+1} \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1})} \mathcal{F}_{n+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{n+1}+1} d\rho,
\end{aligned}$$

Тут

$$c_{j_k} = \bar{\alpha}_{2j}^k \cdot \bar{\beta}_{1j}^k - \bar{\alpha}_{1j}^k \cdot \bar{\beta}_{2j}^k; \quad k = \overline{1, n}; \quad j = \overline{1, 2};$$

$$-\frac{c_{1_k}}{q_k^{2\alpha_k} \cdot R_k^{2\alpha_k+1}} = U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_k R_k); \quad k = \overline{1, n};$$

$$-\frac{c_{2_k}}{q_{k+1}^{2\alpha_{k+1}} \cdot R_{k+1}^{2\alpha_{k+1}+1}} = U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1} R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1} R_k) - U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_{k+1} R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1} R_k); \quad k = \overline{1, n};$$

Припустимо, що виконана умова однозначної розв'язності крайової задачі (4.82)-(4.84), тобто визначник алгебраїчної системи (4.97) є відмінним від нуля:

$$\Delta_{\nu\alpha}^*(p) \equiv U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \cdot \Delta'_{1,2n-1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \cdot \Delta_{1,2n-1} \neq 0. \quad (4.98)$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (4.97) та підстановки одержаних значень $A_1, A_k, B_k, B_{n+1}, k = \overline{2, n}, D_{1j}, D_{2j}, E_{1j}, E_{2j}, j = \overline{1, n+1}$ в (4.85) і після низки перетворень шляхом розкриття визначників $\Delta_{A_1}^* I_{v_1 \alpha_1}(q_1 r), \Delta_{A_k}^* I_{v_k \alpha_k}(q_k r) + \Delta_{B_k}^* K_{v_k \alpha_k}(q_k r), k = \overline{2, n}$, отримуємо рекурентні вирази для обчислення компонентів $C_k^*(p, r)$ вектор-функції $C^*(p, r)$ - розв'язку крайової задачі (4.82)-(4.84) у вигляді:

$$C_k^*(p, r) = \sum_{j=1}^n \left[\mathcal{R}_{1k,j}^*(p, r) \cdot \omega_{1j} + \mathcal{R}_{2k,j}^*(p, r) \cdot \omega_{2j} \right] + \sum_{j=1}^{n+1} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{H}_{v \alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho) \cdot \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; k = \overline{1, n+1}; R_0 = 0; R_{n+1} = \infty \quad (4.99)$$

Тут головні розв'язки крайової задачі (4.82)-(4.84) подані нижче.

Матриці функції впливу j -го джерела системи $\mathcal{F}_j^*(p, \rho)$ на k -тий сегмент неоднорідного нанопористого середовища $\mathcal{H}_{v \alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho)$:

- впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) джерела на перший сегмент середовища:

$$\mathcal{H}_{v \alpha_{11}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{v \alpha}^*(p)} \begin{cases} I_{v \alpha_1}(q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{v \alpha_{11}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A_{1,1} - \Phi_{v \alpha_{21}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A'_{1,1} \right], 0 < \rho < r < R_1 \\ I_{v \alpha_1}(q_1 r) \cdot \left[\Phi_{v \alpha_{11}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A_{1,1} - \Phi_{v \alpha_{21}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A'_{1,1} \right], 0 < r < \rho < R_1 \end{cases}, j = \overline{2, n};$$

$$\mathcal{H}_{v \alpha_{1j}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_j^{2\alpha_j} \cdot \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{v \alpha}^*(p)} I_{v \alpha_1}(q_1 r) \left[\Phi_{v \alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A_{1,2j-1} - \Phi_{v \alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A'_{1,2j-1} \right]; \quad (4.100)$$

$j = \overline{2, n}$

$$\mathcal{H}_{v \alpha_{1,n+1}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{v \alpha}^*(p)} \cdot I_{v \alpha_1}(q_1 r) \cdot K_{v \alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho);$$

- впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) джерела на k -й сегмент ($k = \overline{2, n}$) середовища:

$$\mathcal{H}_{v \alpha_{k1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{v \alpha}^*(p)} \cdot \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-c_{1s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} I_{v \alpha_1}(q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{v \alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A'_{1,2k-1} - \Phi_{v \alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{1,2k-1} \right].$$

$$\mathcal{H}_{v \alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^{k-1} \frac{-c_{1s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{v \alpha}^*(p)} \left[\Phi_{v \alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{v \alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right];$$

$$\cdot \left[\Phi_{v \alpha_{22}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{1,2j-3} - \Phi_{v \alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta'_{1,2j-3} \right]; j = \overline{2, k-1}; k = \overline{2, n}$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3}' \right]; \quad (4.101)$$

$$\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) \cdot \Delta_{1,2j-1}' - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) \cdot \Delta_{1,2j-1} \right]; j = \overline{k+1, n}; k = \overline{2, n}$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kk}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} & \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta_{1,2k-3}' \right] \cdot \\ & \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-3}' \right] \cdot \\ & \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-1}' - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-1} \right], R_{k-1} < \rho < r < R_k \\ & \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot \Delta_{1,2k-1}' - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot \Delta_{1,2k-1} \right], R_{k-1} < r < \rho < R_k \end{aligned} \right.;$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,n+1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p) \cdot \Delta_{\nu\alpha_{11}}^{2\alpha_{s+1}+1}} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho) \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3}' \right]; k = \overline{2, n}$$

впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) на $n+1$ -ий сегмент середовища:

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot I_{\nu\alpha_1}(q_1 \rho) \cdot K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r).$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,j}}^*(p, r, \rho) = - \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{12}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{1,2j-3}' - \Phi_{22}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{1,2j-3} \right] \cdot K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r), \quad (4.102)$$

$j = \overline{2, n}$

$$\mathcal{H}_{n+1,n+1}^*(p, r, \rho) = - \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} & K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho) \cdot \left[\Phi_{12}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta_{1,2n-1}' - \Phi_{22}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta_{1,2n-1} \right], R_n < \rho < r < R_{n+1} \\ & K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) \cdot \left[\Phi_{12}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta_{1,2n-1}' - \Phi_{22}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta_{1,2n-1} \right], R_n < r < \rho < R_{n+1} \end{aligned} \right. .$$

Функції впливу неоднорідностей першої умови j -го інтерфейсу $\omega_{1,j}$, $j = \overline{1, n}$ на k -тий сегмент середовища $\mathcal{R}_{1,k,j}^*(p, z)$; $k = \overline{1, n+1}$; $j = \overline{1, n}$

- впливу неоднорідностей першої умови j -го інтерфейсу $\omega_{1,j}$ на перший сегмент середовища $\mathcal{R}_{1,1,j}^*(p, z)$; $j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{1,j}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} & I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) A_{1,1} \quad ; j = 1 \\ & \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) A_{1,2j-1} \quad ; j = \overline{2, n-1}, \\ & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \cdot \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot I_{\nu\alpha_1}(q_1 r) \quad ; j = n \end{aligned} \right. \quad (4.103)$$

- впливу неоднорідностей першої умови j – го інтерфейсу $\omega_{1,j}, j = \overline{1, n}$ на k - тий сегмент середовища $\mathcal{R}_{1,k,j}^* (p, z); k = \overline{2, n}; j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{1,j}^* (p, r) = \frac{1}{\Delta_{v\alpha}^* (p)} \begin{cases} U_{v\alpha_{21}}^{11} (q_1 R_1) \prod_{s=2}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{12}}^k (q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{v\alpha_{11}}^k (q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right) & ; j=1 \\ \Delta'_{1,2j-1} \prod_{s=j+1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{21}}^k (q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{v\alpha_{11}}^k (q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right) & ; j=\overline{2, k-1} \\ A_{1,2j-1} \left(\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1} (q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-1} (q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j=k \\ A_{1,2j-1} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1} (q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-2} (q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j=\overline{k+1, n-1} \\ -U_{v\alpha_{22}}^{n,2} (q_{n+1} R_n) \cdot \prod_{s=k}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1} (q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-2} (q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j=n \end{cases} \quad (4.104)$$

- впливу неоднорідностей першої умови j – го інтерфейсу $\omega_{1,j}, j = \overline{1, n}$ на $n+1$ - ий сегмент середовища $\mathcal{R}_{1,n+1,j}^* (p, z); j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{1,n+1,j}^* (p, z) = \frac{1}{\Delta_{v\alpha}^* (p)} \begin{cases} U_{v\alpha_{21}}^{11} (q_1 R_1) \prod_{s=2}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot K_{v\alpha_{n+1}} (q_{n+1} r) & ; j=1 \\ \Delta'_{1,2j-1} \prod_{s=2}^{n-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot K_{v\alpha_{n+1}} (q_{n+1} r) & ; j=\overline{2, n-1}; \\ \Delta'_{1,2n-1} \cdot K_{v\alpha_{n+1}} (q_{n+1} r) & ; j=n \end{cases} \quad (4.105)$$

Функції впливу неоднорідностей другої умови j – го інтерфейсу $\omega_{2,j}, j = \overline{1, n}$ на k – тий сегмент середовища $\mathcal{R}_{2,k,j}^* (p, z); k = \overline{1, n+1}; j = \overline{1, n}$:

- впливу неоднорідностей другої умови j – го інтерфейсу $\omega_{2,j}$ на перший сегмент середовища $\mathcal{R}_{2,1,j}^* (p, z); j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{2,1,j}^* (p, r) = \frac{1}{\Delta_{v\alpha}^* (p)} \begin{cases} I_{v\alpha_1} (q_1 r) A'_{1,1} & ; j=1 \\ \prod_{s=12}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} I_{v\alpha_1} (q_1 r) A'_{1,2j-1} & ; j=\overline{2, n-1} \\ \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} I_{v\alpha_1} (q_1 r) \Delta_{v\alpha_{21}} (q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) & ; j=n \end{cases} \quad (4.106)$$

- впливу неоднорідностей другої умови j – го інтерфейсу $\omega_{2,j}, j = \overline{1, n}$ на k - тий сегмент середовища $\mathcal{R}_{2_{k,j}}^*(p, r); k = \overline{2, n}; j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{2_{kj}}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{va}^*(p)} \begin{cases} U_{va_{11}}^{11}(q_1 R_1) \prod_{s=2}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{va_{12}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{va_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right) & ; j=1 \\ \Delta_{1,2j-1} \prod_{s=j+1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{va_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k-1} - \Phi_{va_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k-1} \right) & ; j = \overline{2, k-1} \\ A'_{1,2k-1} \left(\Phi_{va_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{va_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j=k \\ A'_{1,2j-1} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{va_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{va_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j = \overline{k+1, n-1} \\ -U_{va_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \cdot \prod_{s=k}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{va_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-3} - \Phi_{va_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-3} \right) & ; j=n \end{cases} \quad ; (4.107)$$

- впливу неоднорідностей другої умови j – го інтерфейсу $\omega_{2,j}, j = \overline{1, n}$ на $n+1$ - ший сегмент середовища $\mathcal{R}_{2_{n+1,j}}^*(p, r); j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{2_{n+1,j}}^*(p, r) = -\frac{1}{\Delta_{va}^*(p)} \begin{cases} U_{va_{11}}^{11}(q_1 R_1) \prod_{s=2}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot K_{va_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j=1 \\ \Delta_{1,2j-1} \prod_{s=2}^{n-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot K_{va_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j = \overline{2, n-1} \\ \Delta_{1,2n-1} \cdot K_{va_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j=n \end{cases} \quad (4.108)$$

Перехід до оригіналів. Особливими точками головних розв'язків крайової задачі (4.82) - (4.84) $\mathcal{R}_{1_{kj}}^*(p, r), \mathcal{R}_{2_{kj}}^*(p, r), \mathcal{H}_{va_{k,k_1}}^*(p, r, \rho) \in$ точки галуження $p = \infty$ та

$$p_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[S_1 \pm \sqrt{S_2} \right] < 0. S_1 = \beta_k(1 + \gamma_k) + \eta_k^2; S_2 = (\eta_k - \beta_k \gamma_k)^2 = \beta_k \left[\beta_k(1 + 2\gamma_k) + 2\eta_k^2 \right] > 0. \quad (4.109)$$

Отже, при переході до оригіналів за Лапласом інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі [3]:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{m_{kj}}(t, r) &= L^{-1} \left[\mathcal{R}_{m_{kj}}^*(p, r) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \mathcal{R}_{m_{kj}}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} \mathcal{R}_{m_{kj}}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{R}_{m_{kj}}^*(is, r) \cdot e^{ist} ds = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[\mathcal{R}_{m_{kj}}^*(is, r) \cdot e^{ist} \right] ds; m = \overline{1, 2}; \end{aligned} \quad (4.110)$$

$$\mathcal{H}_{k,k_1}^*(t, r, \rho) = L^{-1} \left[\mathcal{H}_{k,k_1}^*(p, r, \rho) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[\mathcal{H}_{k,k_1}^*(is, r, \rho) \cdot e^{ist} \right] ds.$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (4.197), з врахуванням одержаних головних розв'язків задачі (4.82)-(4.84) та формул (4.155), отримуємо єдиний розв'язок вихідної крайової задачі (4.77)-(4.81):

$$C_k(t, r) = \sum_{j=1}^n \int_0^t \left[\mathcal{R}_{1kj}(t-\tau, r) \cdot \omega_{1j}(\tau) + \mathcal{R}_{2kj}(t-\tau, r) \cdot \omega_{2j}(\tau) \right] d\tau + \\ + \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \mathcal{H}_{k, k_1}(t-\tau; r, \rho) \cdot \left[f_{k_1}(\tau, \rho) + C_{0_{k_1}}(\rho) \cdot \delta_+(\tau) \right] \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau + \\ + \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1}}{D_{z_{k_1}}} \mathcal{H}_{k, k_1}(t-\tau; r, \rho) e^{-\beta_{k_1} \gamma_{k_1} \tau} \cdot a_{0_{k_1}}(\rho) \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau; \quad (4.111)$$

$$a_k(t, r) = \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k (t-\tau)} \cdot C_k(\tau, r) d\tau + e^{-\beta_k \gamma_k t} \cdot a_{0_k}(r). \quad (4.112)$$

$$\text{Тут } \omega_{mj} = \left[\left(\delta_{m1}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{m1}^j \right) \cdot C_{0_j}(z) - \left(\delta_{m2}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{m2}^j \right) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j} \cdot \delta_+(t); m = \overline{1, 2}; j = \overline{1, n}.$$

Із викладеного вище випливає твердження:

Теорема 4.3.1 (про розв'язність): Якщо справджується умова необмеженої розв'язності крайової задачі (умова Шапіро - Лопатинського) і задані функції є оригіналами за Лапласом і задовольняють умови Гельдера з показником α по z , то розв'язок крайової задачі (4.77)-(4.81) існує і єдиний та визначається формулами (4.111), (4.112).

4.4. Методологія побудови розв'язків крайових задач адсорбції в необмежених неоднорідних циліндричних нанопористих середовищах з симетричною порожниною

Розглядається задача масопереносу в неоднорідному необмеженому циліндричному n - інтерфейсному по радіальній координаті r нанопористому середовищі, заповненому n круговими шарами адсорбентів різної пористої структури. Математична модель такого переносу з урахуванням швидкостей зміни градієнтів концентрацій адсорбтиву на масообмінних поверхнях (крайових поверхнях і поверхнях контакту $r = R_{j-1}, j = \overline{1, n}$) та поданих вище фізичних припущень може бути описана у вигляді такої змішаної крайової задачі:

$$\text{побудувати обмежений в області } D_n = \left\{ (t, r) : t > 0, r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 > 0, R_{n+1} = \infty \right\}$$

розв'язок системи диференціальних рівнянь в частинних похідних

$$\frac{\partial C_j(t, r)}{\partial t} + \frac{\partial a_j(t, r)}{\partial t} + \eta_j^2 C_j = D_{r_j} B_{v\alpha_j} [C_j] + f_j(t, r) \quad (4.113)$$

$$\frac{\partial a_j}{\partial t} = \beta_j (C_j - \gamma_j a_j) \quad (4.141)$$

з початковими умовами:

$$C_j(t, r)_{t=0} = C_{0_j}(r); a_j(t, r)_{t=0} = a_{0_j}(r); \quad (4.115)$$

крайовими умовами і системою інтерфейсних умов по координаті r :

$$[(\alpha_{12}^0 + \delta_{12}^0) \frac{\partial}{\partial t} + (\beta_{12}^0 + \gamma_{12}^0) \frac{\partial}{\partial r}] C_1(t, r) \Big|_{r=R_0} = \omega_0(t); \frac{\partial}{\partial r} C_{n+1}(t, r) \Big|_{r=\infty} = 0; \quad (4.116)$$

$$\left[[(\alpha_{i1}^j + \delta_{i1}^j) \frac{\partial}{\partial t} + (\beta_{i1}^j + \gamma_{i1}^j) \frac{\partial}{\partial r}] C_j(t, r) - [(\alpha_{i2}^j + \delta_{i2}^j) \frac{\partial}{\partial t} + (\beta_{i2}^j + \gamma_{i2}^j) \frac{\partial}{\partial r}] C_{j+1}(t, r) \right] \Big|_{r=R_j} = 0; \quad (4.117)$$

$$j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}$$

Теорема 4.4.1 (про розв'язність): Якщо задовольняється умова необмеженої розв'язності крайової задачі і задані функції є оригіналами за Лапласом та задовольняють умову Гельдера з показником α по r ($0 < \alpha \leq 1$):

$$|g(r) - g(\rho)| \leq |r - \rho|^\alpha \cdot C; C < \infty,$$

то розв'язок крайової задачі (4.160)-(4.164) існує і єдиний.

Доведення: В припущенні, що шукані вектор – функції $C(t, r)$, $a(t, r)$ є оригіналами за Лапласом, застосуємо до крайової задачі (4.113)-(4.117) інтегральне перетворення Лапласа стосовно часової змінної t [3]. В результаті отримаємо крайову задачу: побудувати обмежений на множині

$$I_n = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 > 0, R_{n+1} = \infty \right\} \text{ розв'язок системи диференціальних}$$

рівнянь Бесселя для модифікованих функцій:

$$[B_{v\alpha_j} - q_j^2(p)] C_j^*(p, r) = -\mathcal{F}_j^*(p, r) \quad (4.118)$$

з крайовими умовами

$$[\bar{\alpha}_{12}^0 \frac{\partial}{\partial r} + \bar{\beta}_{12}^0] C_1^*(p, r) \Big|_{r=R_0} = \omega_{R_0}^*(p); \frac{\partial}{\partial r} C_{n+1}^*(p, r) \Big|_{r=\infty} = 0; \quad (4.119)$$

та системою інтерфейсних умов :

$$\left[\left(\bar{\alpha}_{i1}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{i1}^j \right) C_j^*(p, r) - \left(\bar{\alpha}_{i2}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{i2}^k \right) C_{j+1}^*(p, r) \right] \Big|_{r=R_j} = \omega_{ij}; j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}. \quad (4.120)$$

$$\text{Тут} \quad \mathcal{F}_j^*(p, r) = \frac{1}{D_{r_j}} [f_j^*(p, r) + C_{o_j}(r) + \frac{\beta_j \gamma_j}{p + \beta_j \gamma_j} a_{0_j}(r)];$$

$$\omega_{R_0}^*(p) = \omega_0^*(p) + \left(\delta_{12}^0 \frac{d}{dr} + \gamma_{12}^0 \right) C_{0_1}(R_0) \equiv \omega_0^*(p) + \omega_{1,1};$$

$$\omega_{ij} = \left[\left(\delta_{i1}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i1}^j \right) C_{0_i}(r) - \left(\delta_{i2}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i2}^j \right) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j};$$

$$q_j^2(p) = \frac{1}{D_{r_j} (p + \beta_j \gamma_j)} \left[p^2 + p (\beta_j (1 + \gamma_j) + \beta_j \gamma_j \cdot \eta_j^2) \right];$$

$$\bar{\alpha}_{im}^j = \alpha_{im}^j + \delta_{im}^j \cdot p; \bar{\beta}_{im}^j = \beta_{im}^j + \gamma_{im}^j \cdot p; j = \overline{1, n}; i, m = \overline{1, 2};$$

$$a_j^*(p, r) = \frac{a_{0_j}(r)}{p + \beta_j \gamma_j} + \frac{\beta_j(r)}{p + \beta_j \gamma_j} C_j^*(p, r); j = \overline{1, n+1}.$$

Зафіксувавши вітку дволисної функції $q_j(p)$, на якій $\text{Re } q_j(p) > 0$, внаслідок властивостей функцій які утворюють фундаментальну систему розв'язків рівняння Бесселя (4.118), розв'язок неоднорідної крайової задачі (4.118)-(4.120) будемо методом функцій Коші [11]:

$$C_j^*(p, r) = A_j \cdot I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + B_j \cdot K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; j = \overline{1, n};$$

$$C_{n+1}^*(p, r) = B_{n+1} \cdot K_{\nu_{\alpha_{n+1}}}(q_{n+1} r) + \int_{R_n}^{\infty} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_{n+1}}}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_{n+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{n+1}+1} d\rho, \quad (4.121)$$

де $\mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho)$, $j = \overline{1, n+1}$ - функції Коші:

$$\begin{cases} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} = 0; \\ \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} = -\rho^{-(2\alpha_j+1)}. \end{cases} \quad (4.122)$$

Функції Коші $\mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho)$, $j = \overline{1, n+1}$ шукаємо у вигляді:

$$\mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^{-*} = D_{1_j} I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + E_{1_j} K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r); R_{j-1} < r < \rho < R_j \\ \mathcal{E}_{\nu_{\alpha_j}}^{+*} = D_{2_j} I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + E_{2_j} K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r); R_{j-1} < \rho < r < R_j \end{cases}; j = \overline{1, n},$$

$$\mathcal{E}_{\nu\alpha_{n+1}}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu\alpha_{n+1}}^{-*} = D_{1_{n+1}} I_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}r) + E_{1_{n+1}} K_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}r); R_n < r < \rho < \infty \\ \mathcal{E}_{\nu\alpha_{n+1}}^{+*} = E_{2_{n+1}} K_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}r); R_n < \rho < r < \infty \end{cases}, \quad (4.123)$$

з урахуванням додаткових умов для $j = \overline{1, n}$:

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^{j-1} \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{12}^{j-1} \right) \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^{-*} \Big|_{r=R_{j-1}} = 0 \quad (1\text{-ша права умова } j\text{-го інтерфейсу} - \text{ для } r = R_{j-1}), \quad (4.124)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{11}^j \right) \mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^{+*} \Big|_{r=l_j} = 0 \quad (1\text{-ша ліва умова } j\text{-го інтерфейсу} - \text{ для } r = R_j - 0), \quad (4.125)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^n \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{12}^n \right) \mathcal{E}_{\nu\alpha_{n+1}}^{-*} \Big|_{r=R_n} = 0 \quad (1\text{-ша ліва умова } n\text{-го інтерфейсу} - \text{ для } r = R_n). \quad (4.126)$$

При $j=0$ в (4.126) буде використана ліва крайова умова.

Для визначення сталих $D_{1_k}, E_{1_k}, D_{2_k}, E_{2_k}$ функцій Коші $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho), k = \overline{1, n}$ та $D_{1_{n+1}}, E_{1_{n+1}}, E_{2_{n+1}}$ маємо дві алгебраїчні системи рівнянь :

$$\left. \begin{aligned} & (D_{2_k} - D_{1_k}) I_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho) + (E_{2_k} - E_{1_k}) K_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho) = 0 \\ & (D_{2_k} - D_{1_k}) \left(\frac{\nu_k - \alpha_k}{\rho} I_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho) + R_k q_k^2 I_{\nu_k + 1, \alpha_k + 1}(q_k \rho) \right) + \\ & ; + (E_{2_k} - E_{1_k}) \left(\frac{\nu_k - \alpha_k}{\rho} K_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho) - R_k q_k^2 K_{\nu_k + 1, \alpha_k + 1}(q_k \rho) \right) = - \frac{1}{q_k \cdot \rho^{2\alpha_k + 1}} \\ & D_{1_k} \cdot U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) + E_{1_k} \cdot U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) = 0 \\ & D_{2_k} \cdot U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) + E_{2_k} \cdot U_{\nu\alpha_{11}}^{k,2}(q_k R_k) = 0 \end{aligned} \right\}. \quad (4.127)$$

. Для визначення сталих функцій Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_{n+1}}^*(p, r, \rho)$ внаслідок (4.126), отримуємо алгебраїчну систему рівнянь :

$$\left. \begin{aligned} & -D_{1_{n+1}} \cdot I_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) + (E_{2_{n+1}} - E_{1_{n+1}}) K_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) = 0 \\ & -D_{1_{n+1}} \cdot \left(\frac{\nu_{n+1} - \alpha_{n+1}}{\rho} I_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) + \rho q_{n+1}^2 I_{\nu_{n+1}+1, \alpha_{n+1}+1}(q_{n+1}\rho) \right) + \\ & + (E_{2_{n+1}} - E_{1_{n+1}}) \left(\frac{\nu_{n+1} - \alpha_{n+1}}{\rho} K_{\nu_{n+1}\alpha_{n+1}}(q_{n+1}\rho) - \rho q_{n+1}^2 K_{\nu_{n+1}+1, \alpha_{n+1}+1}(q_{n+1}\rho) \right) = - \frac{1}{q_{n+1} \cdot \rho^{2\alpha_k + 1}} \\ & D_{1_{n+1}} \cdot U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_{n+1}R_n) + E_{1_{n+1}} \cdot U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1}R_n) = 0 \end{aligned} \right\}; (4.128)$$

Із алгебраїчних систем (4.127), (4.128) :

$$D_{2_k} - D_{1_k} = -q_k^{2\alpha_k} K_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho); \quad E_{2_k} - E_{1_k} = q_k^{2\alpha_k} I_{\nu_k \alpha_k}(q_k \rho).$$

$$-D_{1_{n+1}} = -q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}} K_{\nu_{n+1} \alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho); \quad E_{2_{n+1}} - E_{1_{n+1}} = q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}} I_{\nu_{n+1} \alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho).$$

В результаті однозначної розв'язності алгебраїчних систем (4.127) і (4.128) функції Коші $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho); k = \overline{1, n+1}$ є визначеними і внаслідок симетрії відносно діагоналі $r = \rho$ мають структуру:

$$\mathcal{E}_{\nu \alpha_k}^*(p, r, \rho) = \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{\nu \alpha_{11}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k)} \begin{cases} \Phi_{\nu \alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot \Phi_{\nu \alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r), R_{k-1} < r < \rho < R_k \\ \Phi_{\nu \alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Phi_{\nu \alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho), R_{k-1} < \rho < r < R_k \end{cases}, k = \overline{1, n};$$

$$\mathcal{E}_{\nu \alpha_{n+1}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{U_{\nu \alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_n)} \begin{cases} K_{\nu \alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho) \cdot \Phi_{\nu \alpha_{12}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r), R_n < r < \rho < \infty \\ K_{\nu \alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) \cdot \Phi_{\nu \alpha_{12}}^n(q_{n+1} R_{n+1}, q_{n+1} \rho), R_n < \rho < r < \infty \end{cases}. \quad (4.129)$$

тут

$$U_{\nu \alpha_{im}}^{j1}(q_s R_j) = (\bar{\alpha}_{im}^j \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{im}^j) I_{\nu_j \alpha_j}(q_s r) \Big|_{r=R_j} = (\bar{\alpha}_{im}^j \frac{\nu_j - \alpha_j}{R_j} + \bar{\beta}_{im}^j) I_{\nu_j \alpha_j}(q_s R_j) + \bar{\alpha}_{im}^j R_j q_s^2 I_{\nu_j+1, \alpha_j+1}(q_s R_j);$$

$$U_{\nu \alpha_{im}}^{j2}(q_s R_j) = (\bar{\alpha}_{im}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{im}^j) K_{\nu_j \alpha_j}(q_s r) \Big|_{r=R_j} = (\bar{\alpha}_{im}^j \frac{\nu_j - \alpha_j}{R_j} + \bar{\beta}_{im}^j) K_{\nu_j \alpha_j}(q_s R_j) - \bar{\alpha}_{im}^j R_j q_s^2 K_{\nu_j+1, \alpha_j+1}(q_s R_j);$$

$$\Phi_{\nu \alpha_{im}}^j(q_s R_j, q_s r) = U_{\nu \alpha_{im}}^{j1}(q_s R_j) \cdot K_{\nu_j \alpha_j}(q_s r) - U_{\nu \alpha_{im}}^{j2}(q_s R_j) \cdot I_{\nu_j \alpha_j}(q_s r),$$

$$\Delta_{\nu \alpha_{im}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu \alpha_{ki2}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu \alpha_{km1}}^{k,2}(q_k R_k) - U_{\nu \alpha_{ki2}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu \alpha_{km1}}^{k,1}(q_k R_k).$$

$$k = \overline{2, n}; i, m = \overline{1, 2}$$

При відомих функціях Коші $\mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^*(p, r, \rho)$ крайові умови в точках $r = R_0$ і $r = R_{n+1}$ та умови інтерфейсу (4.119) для визначення невідомих коефіцієнтів $A_j, B_j, C_j, D_j, E_j, F_j, G_j, H_j, I_j, J_j, K_j, L_j, M_j, N_j, O_j, P_j, Q_j, R_j, S_j, T_j, U_j, V_j, W_j, X_j, Y_j, Z_j, A_{n+1}, B_{n+1}, C_{n+1}, D_{n+1}, E_{n+1}, F_{n+1}, G_{n+1}, H_{n+1}, I_{n+1}, J_{n+1}, K_{n+1}, L_{n+1}, M_{n+1}, N_{n+1}, O_{n+1}, P_{n+1}, Q_{n+1}, R_{n+1}, S_{n+1}, T_{n+1}, U_{n+1}, V_{n+1}, W_{n+1}, X_{n+1}, Y_{n+1}, Z_{n+1}$, що беруть участь у структурах (4.121) загального розв'язку крайової задачі (4.118)-(4.119) $C_j^*(p, r)$, дають алгебраїчну систему із $2n+1$ - рівняння:

$$\left. \begin{aligned}
& U_{\nu\alpha_{12}}^{01}(q_1 R_0)A_1 + U_{\nu\alpha_{12}}^{02}(q_1 R_0)B_1 = \omega_{R_0}^* \\
& U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1)A_1 + U_{\nu\alpha_{11}}^{12}(q_1 R_1)B_1 - U_{\nu\alpha_{12}}^{11}(q_2 R_1)A_2 - U_{\nu\alpha_{12}}^{12}(q_2 R_1)B_2 = \omega_{1_1} \\
& U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1 R_1)A_1 + U_{\nu\alpha_{21}}^{12}(q_1 R_1)B_1 - U_{\nu\alpha_{22}}^{11}(q_2 R_1)A_2 - U_{\nu\alpha_{22}}^{12}(q_2 R_1)B_2 = \omega_{2_1} + G_1^* \\
& \text{-----} \\
& U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k)A_k + U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k)B_k - U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1} R_k)A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k2}(q_{k+1} R_k)B_{k+1} = \omega_{1_k} \\
& U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}(q_k R_k)A_k + U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k)B_k - U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1} R_k)A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1} R_k)B_{k+1} = \omega_{2_k} + G_k^* \\
& \text{-----} \\
& U_{\nu\alpha_{11}}^{n,1}(q_n R_n)(q_n l_n)A_n + U_{\nu\alpha_{11}}^{n,2}(q_n R_n)B_n - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n)B_{n+1} = \omega_{1_n} \\
& U_{\nu\alpha_{21}}^{n,1}(q_n R_n)A_n + U_{\nu\alpha_{21}}^{n,2}(q_n R_n)B_n - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n)B_{n+1} = \omega_{2_n} + G_n^*
\end{aligned} \right\}. \quad (4.130)$$

Тут G_j^* вирази, що містять інтеграли від функцій Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ в (4.130):

$$G_j^* = \frac{c_{1_j}}{R_j^{2\alpha_j+1}} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_j R_{j-1}, q_j R_{j-1})} \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho - \frac{c_{2_j}}{R_j^{2\alpha_{j+1}+1}} \int_{R_j}^{R_{j+1}} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{11}}^{j+1}(q_{j+1} R_{j+1}, q_{j+1} \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{j+1} R_j, q_{j+1} R_{j+1})} \mathcal{F}_{j+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{j+1}+1} d\rho, j = \overline{1, n-1}.$$

$$G_n^* = \frac{c_{1_n}}{R_n^{2\alpha_n+1}} \int_{R_{n-1}}^{R_n} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{n-1}(q_n R_{n-1}, q_n \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_n R_{n-1}, q_n R_n)} \mathcal{F}_n^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_n+1} d\rho + \frac{c_{2_n}}{R_n^{2\alpha_{n+1}+1}} \int_{R_n}^{\infty} \frac{K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho)}{U_{\nu\alpha_{n+1}}^{n,2}(q_{n+1} R_n)} \mathcal{F}_{n+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{n+1}+1} d\rho,$$

$$c_{j_k} = \bar{\alpha}_{2_j}^k \cdot \bar{\beta}_{1_j}^k - \bar{\alpha}_{1_j}^k \cdot \bar{\beta}_{2_j}^k; k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2};$$

$$-\frac{c_{1_k}}{q_k^{2\alpha_k} \cdot R_k^{2\alpha_k+1}} = U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_k R_k); k = \overline{1, n};$$

$$-\frac{c_{2_k}}{q_{k+1}^{2\alpha_{k+1}} \cdot R_{k+1}^{2\alpha_{k+1}+1}} = U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1} R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1} R_k) - U_{\nu\alpha_{12}}^{k2}(q_{k+1} R_k) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1} R_k); k = \overline{1, n};$$

Припустимо, що має місце умова однозначної розв'язності крайової задачі (4.118)-(4.119) - визначник алгебраїчної системи (4.130) не рівний нулю:

$$\Delta_{\nu\alpha}^*(p) \equiv U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_n R_n) \Delta'_{1,2n} - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1}(q_n R_n) \Delta_{1,2n} \neq 0. \quad (4.131)$$

В результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (4.130), підстановки отриманих значень $A_k, B_k, B_{n+1}, D_{1_k}, D_{2_k}, E_{1_k}, E_{2_k}, D_{1_{n+1}}, E_{1_{n+1}}, E_{2_{n+1}}; k = \overline{1, n}$ в (4.173) після низки перетворень шляхом розкриття визначників $\Delta_{A_k}^* I_{\nu_k \alpha_k}(q_k r) + \Delta_{B_k}^* K_{\nu_k \alpha_k}(q_k r), k = \overline{1, n}$ одержуємо рекурентні вирази для обчислення компонентів вектор-функції $C^*(p, r)$ - розв'язку крайової задачі (4.118)-(4.119):

$$C_k^*(p, r) = W_{k_1}^*(p, r) \cdot \omega_{R_0}^*(p) + \sum_{j=1}^n \left[\mathcal{R}_{1_{k,j}}^*(p, r) \cdot \omega_{1_j} + \mathcal{R}_{2_{k,j}}^*(p, r) \cdot \omega_{2_j} \right] +$$

$$+ \sum_{j=1}^{n+1} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho) \cdot \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; k = \overline{1, n+1} \quad (4.132)$$

Тут головні розв'язки крайової задачі (4.118)-(4.119) подані нижче.

Вектор функцій впливу лівої крайової умови $\omega_{R_0}^*(p)$ на k -ий сегмент нанопористого середовища $W_{k_1}^*(p, r)$:

$$W_{k_1}^*(p, r) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 R_1, q_1 r) \Delta'_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 R_1, q_1 r) \Delta_{1,2} \right] & ; k = 1 \\ \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Delta'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k} \right] & ; k = \overline{2, n} \\ \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; k = n+1 \end{cases} \quad (4.133)$$

Матриця функції впливу j -го джерела системи $\mathcal{F}_j^*(p, \rho)$ на k -тий сегмент неоднорідного нанопористого середовища $\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho)$:

впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) джерела на перший сегмент середовища:

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{11}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A'_{1,2} \right], R_0 < \rho < r < R_1; \\ \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A'_{1,2} \right], R_0 < r < \rho < R_1 \end{cases};$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{1j}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_j^{2\alpha_j} \cdot \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \left[\Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A_{1,2j} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A'_{1,2j} \right]; \quad (4.134)$$

$j = \overline{2, n}$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{1,n+1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \cdot \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho);$$

- впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) на k -й сегмент ($k = \overline{2, n}$) середовища:

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k1}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \cdot \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{1,2k} \right];$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k} \right] \cdot;$$

$$\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta'_{1,2j-2} \right]; j = \overline{2, k-1}; k = \overline{2, n}$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right]; (4.135)$$

$$\cdot \left[\Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) \cdot A'_{1,2j} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) \cdot A_{1,2j} \right]; j = \overline{k+1, n}; k = \overline{2, n}$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kk}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} & \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta'_{1,2k-2} \right] \cdot \\ & \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta'_{1,2k-2} \right] \cdot \\ & \cdot [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{1,2k}], R_{k-1} < \rho < r < R_k \\ & \cdot [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot A_{1,2k}], R_{k-1} < r < \rho < R_k \end{aligned} \right.;$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k+n+1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho) \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right];$$

- впливу j -го джерела ($j = \overline{1, n+1}$) на $n+1$ -ий сегмент середовища:

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,1}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \cdot K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r);$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,j}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) \left[\Phi_{22}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta'_{1,2j-2} \right], j = \overline{2, n}; (4.136)$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,n+1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} & K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta_{1,2n} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta'_{1,2n} \right], R_n < \rho < r < R_{n+1}; \\ & K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} \rho) \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta_{1,2n} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta'_{1,2n} \right], R_n < r < \rho < R_{n+1} \end{aligned} \right.;$$

Матриці функції впливу неоднорідностей першої умови j -го інтерфейсу $\omega_{1,j}, j = \overline{1, n}$ на k -тий сегмент нанопористого середовища $\mathcal{R}_{1_{k,j}}^*(p, z); k = \overline{1, n+1}; j = \overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{1_j}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \begin{aligned} & \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A_{1,2} & ; j = 1 \\ & \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A_{1,2j} & ; j = \overline{2, n-1}; \\ & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) & ; j = n \end{aligned} \right. (4.137)$$

$$\mathcal{R}_{1_{ij}}^*(p, r) = -\frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Delta_{v\alpha_{12}}(q_1 R_0, q_1 R_1) \prod_{s=2}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left[\Phi_{v\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{v\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k} \right] & ; j=1 \\ \Delta'_{1,2j} \prod_{s=j+1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left[\Phi_{v\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{v\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k} \right] & ; j=\overline{2, k-1} \\ A_{1,2k} \left[\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right] & ; j=k \\ A_{1,2j} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left[\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right] & ; j=\overline{k+1, n-1} \\ -U_{v\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \prod_{s=k}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right) & ; j=n \end{cases} ;$$

(4.138)

$$\mathcal{R}_{1_{n+1,j}}^*(p, z) = -\frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Delta_{v\alpha_{12}}(q_1 R_0, q_1 R_1) \prod_{s=2}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot K_{v\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j=1 \\ \Delta'_{1,2j} \prod_{s=2}^{n-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot K_{v\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j=\overline{2, n-1} \\ \Delta'_{1,2n} \cdot K_{v\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j=n \end{cases} ;$$

(4.139)

Матриці функцій впливу неоднорідностей першої умови j – го інтерфейсу $\omega_{2_j}, j=\overline{1, n}$ на κ – тий сегмент нанопористого середовища $\mathcal{R}_{2_{k,j}}^*(p, z); k=\overline{1, n+1}; j=\overline{1, n}$:

$$\mathcal{R}_{2_{1j}}^*(p, r) = -\frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Phi_{v\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A'_{1,2} & ; j=1 \\ \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{v\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A'_{1,2j} & ; j=\overline{2, n-1} \\ -U_{v\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{v\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) & ; j=n \end{cases} ;$$

(4.140)

$$\mathcal{R}_{2_{kj}}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Delta_{v\alpha_{11}}(q_1 R_0, q_1 R_1) \prod_{s=2}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{v\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k} \right) & ; j=1 \\ \Delta_{1,2j} \cdot \prod_{s=j+1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{v\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k} \right) & ; j=\overline{2, k-1} \\ A'_{1,2k} \left(\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right) & ; j=k \\ A'_{1,2j} \cdot \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right) & ; j=\overline{k+1, n-1} \\ -U_{v\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) \cdot \prod_{s=k}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_{s+1}^{2\alpha_{s+1}+1}} \cdot \left(\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-2}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right) & ; j=n \end{cases} ;$$

(4.141)

$$\mathcal{R}_{2_{n+1,j}}^*(p, z) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_1 R_0, q_1 R_1) \prod_{s=2}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j = 1 \\ \Delta_{1,2j} \prod_{s=2}^{n-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \cdot K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j = \overline{2, n-1} \\ \Delta_{1,2n} \cdot K_{\nu\alpha_{n+1}}(q_{n+1} r) & ; j = n \end{cases} \quad (4.142)$$

Особливими точками головних розв'язків крайової задачі (4.118) - (4.119) $W_{1_k}^*(p, r), \mathcal{R}_{1_{kj}}^*(p, r), \mathcal{R}_{2_{kj}}^*(p, r), \mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,k_1}}^*(p, r, \rho)$ є точки галуження $p = \infty$ і $p_{1,2} = -\frac{1}{2}[S_1 \pm \sqrt{S_2}] < 0$; $S_1 = \beta_k(1 + \gamma_k) + \eta_k^2$; $S_2 = (\eta_k - \beta_k \gamma_k)^2 = \beta_k[\beta_k(1 + 2\gamma_k) + 2\eta_k^2] > 0$. Отже, при переході до оригіналів за Лапласом інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі [3]:

$$\begin{aligned} W_{1_k}(t, r) &= L^{-1}[W_{1_k}^*(p, r)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} W_{1_k}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} W_{1_k}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_{1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist} ds = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}[W_{1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist}] ds; \\ R_{m_{kj}}(t, r) &= L^{-1}[\mathcal{R}_{m_{kj}}^*(p, r)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}[\mathcal{R}_{m_{kj}}^*(is, r) \cdot e^{ist}] ds, m = \overline{1, 2}; \\ \mathcal{H}_{k,k_1}^*(t, r, \rho) &= L^{-1}[\mathcal{H}_{k,k_1}^*(p, r, \rho)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}[\mathcal{H}_{k,k_1}^*(is, r, \rho) \cdot e^{ist}] ds. \end{aligned} \quad (4.143)$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (4.129), з врахуванням одержаних головних розв'язків задачі (4.118)-(4.120), отримуємо єдиний розв'язок вихідної крайової задачі (4.113)-(4.117):

$$\begin{aligned} C_k(t, r) &= \int_0^t W_{1_k}(t - \tau, r) \cdot \omega_{R_0}(t) d\tau + \\ &+ \sum_{j=1}^n \int_0^t [\mathcal{R}_{1_{kj}}(t - \tau, r) \cdot \omega_{1_j}(\tau) + \mathcal{R}_{2_{kj}}(t - \tau, r) \cdot \omega_{2_j}(\tau)] d\tau + \end{aligned} \quad (4.144)$$

$$\begin{aligned} &+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \mathcal{H}_{k,k_1}(t - \tau; r, \rho) \cdot [f_{k_1}(\tau, \rho) + C_{0_{k_1}}(\rho) \cdot \delta_+(\tau)] \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau + \\ &+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1}}{D_{z_{k_1}}} \mathcal{H}_{k,k_1}(t - \tau; r, \rho) e^{-\beta_{k_1} \gamma_{k_1} \tau} \cdot a_{0_{k_1}}(\rho) \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau; \end{aligned}$$

$$a_k(t, z) = \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k (t-\tau)} \cdot C_k(\tau, z) d\tau + e^{-\beta_k \gamma_k t} \cdot a_{0_k}(z). \quad (4.145)$$

Тут

$$\omega_{R_0}(t) = L\left[\omega_{R_0}^*(p)\right] = \omega_0(t) + \left(\delta_{11}^0 \frac{d}{dz} + \gamma_{11}^0\right) C_{0_1}(r) \Big|_{r=R_0} \cdot \delta_+(t);$$

$$\omega_{mj} = \left[\left(\delta_{m1}^j \frac{d}{dz} + \gamma_{m1}^j\right) \cdot C_{0_j}(z) - \left(\delta_{m2}^j \frac{d}{dz} + \gamma_{m2}^j\right) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j} \cdot \delta_+(t); m = \overline{1, 2}; j = \overline{1, n}.$$

Рекурентні процедури обчислення визначника $\Delta_{va}^*(p)$ системи та визначників $\Delta_{1,2k-1}, \Delta'_{1,2k-1}, \Delta_{1,2k-1}, \Delta'_{1,2k-1}$ подані в [5, 10].

Список джерел до розділу 4

1. Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа. – М.: Физматгиз, 1958. – 207с.
2. Джрбатьян М.М. Интегральные преобразования и представления функций в комплексной области. – М.: Наука, 1966. – 672 с.
3. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. – М.: Наука, 1973. – 736 с.
4. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. – К: Наук. думка, 2000. – 372.
5. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Математичне моделювання адсорбційного масо переносу з спектральним параметром для неоднорідних п- інтерфейсних циліндричних обмежених мікропористих середовищ з порожниною// Вісник Тернопільського державного технічного університету. – 2004.–т. 9. – №4. – С. 147-158.
6. Петрик М.Р. Математичне моделювання нелінійних неізотермічних процесів адсорбції та дифузії в стиснутому шарі сорбенту (узагальнений випадок для неізотермічності функції сорбційної рівноваги)// Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: 36. " наук. пр. – К.: Ін-т. математики АН України, 1994. –Вип. 7. – С. 198-207.
7. Петрик М.Р. Математичне моделювання нелінійних динамічних задач адсорбції та дифузії для нерухомого шару адсорбенту (неізотермічний випадок) // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: 36. наук. пр. – К.: Ін-т. математики АН України, 1993. – Вип. 5. – С. 201-215.
8. Петрик М.Р. Моделювання нелінійних неізотермічних динамічних задач адсорбції та дифузії для стиснутого шару адсорбенту // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: 36. наук. пр. – К.: Ін-т. математики АН України, 1993. –Вип. 4. – С. 239-242.
9. Петрик М., Баб'юк М. Двовимірна осесиметрична математична модель двофазного сорбційного масопереносу із спектральним параметром для напівобмеженого двоскладового (по вісі z) середовища // Математическое моделирование в образовании, науке и промышленности: Сб. научн. тр. – Санкт-Петербург: МАН ВШ, 2000. – С. 133-137.

10. *Петрик М.Р., Ленюк М.П.*, Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для n -інтерфейсних неоднорідних і нанопористих обмежених середовищ// Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика .– 2004. – Вип.2. – С. 59–84.
11. *Степанов В. В.* Курс дифференциальных уравнений.– М.: Физматгиз, 1959.– 468 с.

РОЗДІЛ 5

МОДЕЛЮВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ НЕІЗОТЕРМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ АДСОРБЦІЇ ТА ДЕСОРБЦІЇ ВУГЛЕВОДНІВ В НАНОПОРИСТИХ КАТАЛІТИЧНИХ СИСТЕМАХ

5.1. Моделювання тепломасопереносу, адсорбції і десорбції вуглеводнів в нанопористих цеоліт-катализаторах систем нейтралізації викидних газів

Розробка ефективних математичних моделей дослідження кінетики процесів тепломасопереносу вуглеводнів, що протікають в мікро- і макро порах цеоліт-катализаторів систем нейтралізації вихлопних газів є важливим завданням, що сприяє зниження основних джерел викидів в атмосферу об'єктів виробництва енергії і транспорту.

Викиди автотранспорту, особливо продуктів неповного згорання, кількість яких стрімко збільшується при частих включеннях-вимкненнях бензинових двигунів (режими холостих і «холодних» пусків) під час багатогодинних зупинок у багатокілометрових пробках в великих містах сьогодні складають найбільшу загрозу довкіллю та здоров'ю людей, наближаючи процес глобального потепління [1]. На превеликий жаль, подібна тенденція прогнозується і в найближчому майбутньому, тому Європейським Союзом приймається комплекс рішень на поступове зниження викидів, основну частину яких становлять вуглеводневі продукти, що недокінця прореагував, частина яких сягає до 40% [2].

5.1.1. Математична модель циклічних фаз неізотермічної адсорбції і десорбції в середовищі нанопористих частинок

Вхідний потік газової суміші дифундує в макропорах (межчастинковому просторі) каталітичного середовища і в нанопорах частинок (кристалітів) цеоліту. Основні гіпотези і припущення: в системі досягається стан динамічної рівноваги (насичення), що визначається відповідним градієнтом концентрацій адсорбованого речовини (пропану); закон динамічної рівноваги визначається залежністю Ленгмюра [24]. Процеси адсорбції і десорбції розглядаються у вигляді почергових фаз, визначення тривалості насичення робочого шару адсорбенту, а також тривалістю його регенерації (десорбції поглиненої речовини з мікропор адсорбенту) (рис. 5.1). З причини змін температурного режиму роботи системи і вхідних потоків враховується вплив температурних ефектів на внутрішню кінетику масопереносу.

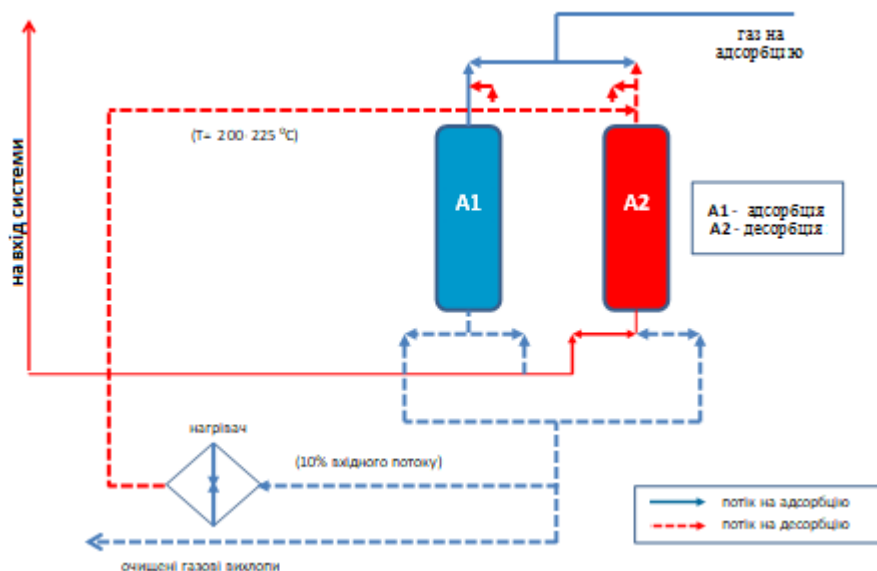


Рисунок 5.1. Схема експериментального блоку циклічної адсорбції і десорбції, моделююча процеси масопереносу в нанопористих каталізаторах

В основі моделі лежить система диференціальних рівнянь в частинних похідних дифузійного масопереносу, які описують зовнішню дифузію адсорбтива в макропорах (газова фаза між кристалітами цеоліту) і внутрішню дифузію в мікро- і нанопорах кристалітів (адсорбція фаза) з урахуванням взаємовпливу потоків в макропорах міжчастинкового простору і сумарної кількості мікропотоків в порах частинок каталітичного середовища. Моделювання кінетики циклічної адсорбції і десорбції для НС-пасток вихлопів в мікропористому робочому середовищі адсорбенту базується на припущеннях [25] і описується наступною крайовою задачею балансу маси і тепла [25-27].

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial z} &= D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \\ -H \frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T}{\partial z} - Q \frac{\partial a}{\partial t} - X^2 T + \Lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} &= 0, \\ \frac{\partial a}{\partial t} &= \beta(c - \gamma a(z, t)), \end{aligned} \quad (5.1)$$

Початкові умови

$$\begin{aligned} \text{а) адсорбція:} & & \text{б) десорбція:} \\ c(t, z)|_{t=0} &= 0, & c(t, z)|_{t=0} &= c_0, \end{aligned} \quad (5.2)$$

$$T(t, z)|_{t=0} = T_0, \quad (5.3)$$

Граничні умови:

$$\begin{aligned} \text{а) адсорбція:} & & \text{б) десорбція:} \end{aligned}$$

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in}, \quad c(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \quad (5.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (5.5)$$

$$T(t, z)|_{z=0} = T_{in}(t), \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0 \quad (5.6)$$

Умовні позначення:

c - концентрація адсорбата в газовій фазі;

a - концентрація адсорбтиву (поглиненої речовини) в твердій фазі;

T - температура газового потоку, °C;

u - швидкість потоку газової фази, м/с²;

D_{inter} - ефективний коефіцієнт дифузії;

Λ - коефіцієнт теплового поздовжнього перемішування уздовж шару адсорбенту;

h_g - теплоємність газу;

Q - величина теплового ефекту адсорбції;

H - сумарна теплоємність адсорбенту і газу;

$\varphi(t, z)$ - функція адсорбційної рівноваги ($\varphi(t, z) \approx \gamma a(t, z)$);

$X^2 = 2\alpha_n / R$ - коефіцієнт тепловтрат через стінку адсорбера;

R – радіус апарату, м;

α_h - коефіцієнт тепловіддачі;

γ - константа Генрі;

β - загальний коефіцієнт масопереносу;

z – координата товщини адсорбційного шару, м;

in - індекс (концентрації і температури) на вході в робочу область.

5.1.2. Побудова аналітичного розв'язку моделі

Аналітичний розв'язок крайової задачі (5.1) - (5.6) по визначенню невідомих функцій залежностей концентрацій $c(t, z)$, $a(t, z)$ і температури $T(t, z)$ від часу і координати z виконано з використанням операційного методу Хевісайда [29,30]. Передбачається, що шукані функції $c(t, z)$, $a(t, z)$, $T(t, z)$, є оригіналами по Лапласа [30]:

$$\begin{aligned} c^*(p, z) &= \int_0^\infty c(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[c], \quad a^*(p, z) = \int_0^\infty a(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[a], \\ T^*(p, z) &= \int_0^\infty T(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[T], \end{aligned} \quad (5.7)$$

де p – комплексний параметр перетворення Лапласа.

Застосовуючи до задачі (5.1) - (5.6) інтегральні оператори перетворення Лапласа (5.7), отримуємо:

$$pc^*(p, z) - c_0 + pa^*(p, z) + u \frac{d}{dz} c^* = D_{inter} \frac{d^2}{dz^2} c^*, \quad (5.8)$$

$$-H(pT^*(p, z) - T_0) - uh_g \frac{\partial}{\partial z} T^* - Qpa^* - X^2 T^* + \Lambda \frac{d^2 T}{dz^2} T^* = 0,$$

$$a^* = \frac{\beta}{p + \beta\gamma} c^* \quad (5.9)$$

Граничні умови:

а) адсорбція:

$$c^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} c_{in},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c^*(p, z)|_{z=\infty} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial z} T^*(p, z)|_{z=\infty} = 0,$$

б) десорбція:

$$\frac{d}{dz} c^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (5.10)$$

$$c^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} c_{in}, \quad (5.11)$$

$$T^*(p, z)|_{z=0} = T_{in}^*(p). \quad (5.12)$$

Рівняння (5.8) - (5.9) перетворюємо до виду:

$$\frac{d^2 c^*}{dz^2} - u_1 \frac{dc^*}{dz} - q^2 c^* = -\mathcal{F}^*, \quad (5.13)$$

$$\frac{d^2 T^*}{dz^2} - u_2 \frac{dT^*}{dz} - q_2^2(p) T^* = -\mathcal{F}_2^*(p), \quad (5.14)$$

$$\text{де } u_1 = \frac{u}{D_{inter}}, \quad q^2(p) = \frac{p(p + \beta(\gamma + 1))}{D_{inter}(p + \beta\gamma)}, \quad \mathcal{F}^* = \frac{c_0}{D_{inter}},$$

$$u_2 = \frac{uh_g}{\Lambda}, \quad q_2^2(p) = \frac{Hp + X^2}{\Lambda}, \quad \mathcal{F}_2^*(p) = \frac{1}{\Lambda} (HT_0 - Q\beta \frac{p}{p + \beta\gamma} c^*(p, z)).$$

Розв'язки рівняння (5.13) з граничними умовами (5.10), (5.11) є [27, 29]:

$$c^*(p, z) = c_{in}^*(p) e^{\left(\frac{u_1 - \omega(p)}{2}\right)z} + \frac{c_0}{D_{inter}} \int_0^\infty \mathcal{E}^*(p, z, \xi) d\xi, \quad (5.15)$$

де $\omega(p) = \left(\frac{1}{4}u_1^2 + q^2(p)\right)^{1/2}$, $\text{Re } \omega > 0$, $\mathcal{E}^*(p, z, \xi)$ - функція Коші будується в вигляді [27, 29]:

$$\mathcal{E}^*(p, z, \xi) = \begin{cases} \mathcal{E}^{-*} = D_1 e^{\left(\frac{u_1}{2} + \omega(p)\right)z} + E_1 e^{\left(\frac{u_1}{2} - \omega(p)\right)z}, & 0 < z < \xi < \infty, \\ \mathcal{E}^{+*} = E_2 e^{\left(\frac{u_1}{2} - \omega(p)\right)z}, & 0 < \xi < z < \infty, \end{cases}$$

задовільняє умовам

$$\begin{aligned} \mathcal{E}^{+*}(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \mathcal{E}^{-*}(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} &= 0, \\ \frac{d}{dz} \mathcal{E}^{+*}(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi+0} - \frac{d}{dz} \mathcal{E}^{-*}(p, z, \xi) \Big|_{z=\xi-0} &= -1 \\ \mathcal{E}^{-*}(p, z, \xi) \Big|_{z=0} &= 0. \end{aligned}$$

Після перетворення функція $\mathcal{E}^*(p, z, \xi)$ має вигляд:

$$\mathcal{E}^*(p, z, \xi) = \frac{1}{2\omega(p)} e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} \left(e^{-|z-\xi|\omega(p)} - e^{-(z+\xi)\omega(p)} \right) \quad (5.16)$$

Після інтегрування вираз (5.15) буде мати вигляд:

$$c^*(p, z) = c_{in}^*(p) e^{\frac{u_1}{2}z} e^{-\omega(p)z} + c_0 \frac{1}{1+\gamma} \left[\frac{\gamma}{p} + \frac{1}{p+\beta(1+\gamma)} \right] \left(1 - e^{\frac{u_1}{2}z} e^{-\omega(p)z} \right). \quad (5.17)$$

Повертаючись до оригіналу по Лапласу в (5.17), будемо мати:

$$\begin{aligned} c(t, z) = c_0 \frac{\gamma}{1+\gamma} L^{-1} \left[\frac{1}{p} \right] + \frac{c_0}{1+\gamma} L^{-1} \left[\frac{1}{p+\beta(1+\gamma)} \right] + c_0 e^{\frac{u_1}{2}z} L^{-1} [c_{in}^*(p)] * L^{-1} [e^{-\omega(p)z}] - \\ - c_0 e^{\frac{u_1}{2}z} L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega(p)z}}{p} \right] + c_0 \beta L^{-1} \left[\frac{1}{p+\beta(\gamma+1)} \right] * L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega(p)z}}{p} \right] e^{\frac{u_1}{2}z} \end{aligned} \quad (5.18)$$

де L^{-1} - символ інтегрального оператора зворотного перетворення Лапласа, $*$ - символ оператора згортки.

Обчислимо оригінал функції $\frac{e^{-\omega(p)z}}{p}$

$$L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{e^{-\omega(p)z}}{p} e^{pt} dp \equiv \mathcal{W}_c^0(t, z). \quad (5.19)$$

Особливими точками функції $\frac{e^{-\omega(p)z}}{p}$ є полюси першого порядку $p=0$ і

точки розгалуження $p=\infty$ та

$$p_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[\beta(\gamma+1) + \frac{1}{4} \frac{u^2}{D_{inter}} \pm \sqrt{\left(\beta(\gamma+1) + \frac{1}{4} \frac{u^2}{D_{inter}} \right)^2 - \beta\gamma \frac{u^2}{D_{inter}}} \right] < 0, \text{ де } \omega(p) = 0.$$

Це дозволяє відповідно до теореми Коші у формулі (5.19) при обчисленні інтеграла по контуру Бромвіча перейти від інтегрування на прямий до інтегрування на уявної осі ($\text{Re } p = 0$) [27, 29]:

$$\mathcal{W}_c^0(t, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\omega(iv)z}}{iv} e^{ivt} d\eta = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Re} \left[\frac{e^{-\omega(iv)z}}{iv} e^{ivt} \right] dv + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}} z. \quad (5.20)$$

Після перетворення і формула (5.20) матиме вигляд

$$\mathcal{W}_c^0(t, z) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{-\varphi_1(v)z} \frac{\sin(vt - z\varphi_2(v)^2)}{v} dv + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}} z, \quad (5.21)$$

Аналогічно обчислюємо оригінал

$$\mathcal{W}_c^{\text{in}}(t, z) \equiv L^{-1} \left[e^{-\omega(p)z} \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{-\varphi_1(v)z} \cos(vt - \varphi_2(v)) dv. \quad (5.22)$$

$$\text{де } \varphi_{1,2}(v) = \left[\frac{(\Gamma_1^2(v) + v^2 \Gamma_2^2(v))^{1/2} \pm \Gamma_1^2(v)}{2} \right]^{1/2},$$

$$\Gamma_1(v) = \frac{u^2}{4D_{\text{inter}}^2} + \frac{v^2 \beta}{D_{\text{inter}}^2 (v^2 + \beta^2 \gamma^2)}, \quad \Gamma_2(v) = \frac{v^3 + v\beta^2(\gamma + 1)\gamma}{D_{\text{inter}} (v^2 + \beta^2 \gamma^2)}.$$

Підставляючи вираз (5.21), (5.22) в формулу (5.18), отримаємо аналітичний розв'язок задачі (5.1) - (5.6) який описує залежності концентрації адсорбату в газовій фазі (міжчастинковому просторі) і концентрацію адсорбтиву (поглиненої речовини) в мікропорах частинок адсорбенту уздовж координати шару каталізатора і в часі:

$$c(t, z) = \frac{\gamma c_0}{1 + \gamma} + \frac{c_0}{1 + \gamma} e^{-\beta(\gamma+1)t} + e^{\frac{u_1}{2D_{\text{inter}}}} z \int_0^t \mathcal{W}_c^{\text{in}}(t-s, z) c_{\text{in}}(s) ds - c_0 e^{\frac{u_1}{2D_{\text{inter}}}} z \mathcal{W}_c^0(t, z) + \quad (5.23)$$

$$+ \beta c_0 e^{\frac{u}{2D_{\text{inter}}}} z \int_0^t e^{-\beta(\gamma+1)(t-s)} \mathcal{W}_c(s, z) ds,$$

$$a(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\gamma\beta(t-\tau)} c(\tau, z) d\tau \quad (5.24)$$

Розв'язок диференціального рівняння (5.14) з умовами (5.12) відповідно до [27, 30]:

$$T^*(p, z) = T_{\text{in}}^*(p) e^{\left(\frac{u_2}{2} - \omega_2(p)\right)z} + \int_0^{\infty} \frac{1}{2\omega_2(p)} e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(e^{-|z-\xi|\omega_2(p)} - e^{-(z+\xi)\omega_2(p)} \right) \mathcal{F}_2^*(p, \xi) d\xi, \quad (5.25)$$

де $\omega_2(p) = \left(\frac{1}{4} u_2^2 + q_2^2(p) \right)^{1/2}$, $\text{Re } \omega_2 > 0$.

Після інтегрування в (25) отримаємо:

$$T^*(p, z) = T_{in}^*(p) e^{\frac{u_2}{2} z} e^{-\omega_2(p) z} + \frac{1}{Hp + X^2} \left(1 - e^{\frac{u_2}{2} z} e^{-\omega_2(p) z} \right) \left(HT_0 - Q\beta \left(1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) c^*(p, z) \right). \quad (5.26)$$

Обчислюючи оригінали по Лапласа в (5/26), отримаємо [27, 30]:

$$\begin{aligned} T(t, z) = & L^{-1} \left[T_{in}^*(p) e^{-\omega_2(p) z} \right] e^{\frac{u_2}{2} z} + T_0 L^{-1} \left[\frac{1}{p + X^2 / H} \right] - T_0 L^{-1} \left[\frac{1}{p + X^2 / H} e^{-\omega_2(p) z} \right] e^{\frac{u_2}{2} z} - \\ & - \frac{Q\beta}{H} \left(L^{-1} \left[\frac{1}{p + X^2 / H} \right] - \frac{\beta\gamma}{\beta\gamma - X^2 / H} L^{-1} \left[\frac{1}{p + X^2 / H} - \frac{1}{p + \beta\gamma} \right] \right) * L^{-1} [c^*(p, z)] + \\ & + \frac{Q\beta}{H} \left(L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p) z}}{p + X^2 / H} \right] - \frac{1}{\beta\gamma - X^2 / H} L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p) z}}{p + X^2 / H} - \frac{e^{-\omega_2(p) z}}{p + \beta\gamma} \right] \right) * L^{-1} [c^*(p, z)] e^{\frac{u_2}{2} z} \end{aligned} \quad (5.27)$$

де оригінали по Лапласу функцій $e^{-\omega_2(p) z}$, $\frac{e^{-\omega_2(p) z}}{p}$, $\frac{e^{-\omega_2(p) z}}{p + X^2 / H}$, $\frac{e^{-\omega_2(p) z}}{p + \beta\gamma}$ мають вигляд [27- 30]:

$$\begin{aligned} \mathcal{W}_T^{in}(t, z) & \equiv L^{-1} [e^{-\omega_2(p) z}] = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\phi_1(v) z} \cos(vt - z\phi_2(v)) dv, \\ \mathcal{W}_{T_{HX}}(t, z) & \equiv L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p) z}}{p + X^2 / H} \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\phi_1(v) z} \frac{(X^2 / H \cos(\phi_2(v) z - vt) - v \sin(\phi_2(v) z - vt))}{(X^2 / H)^2 + v^2} dv, \\ \mathcal{W}_{T_{\beta\gamma}}(t, z) & = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\phi_1(v) z} \frac{(\beta\gamma \cos(\phi_2(v) z - vt) - v \sin(\phi_2(v) z - vt))}{(\beta\gamma)^2 + v^2} dv, \end{aligned} \quad (5.28)$$

де

$$\phi_{1,2}(v) = \left[\frac{(\Gamma_{T_1}^2(v) + v^2 \Gamma_{T_2}^2(v))^{1/2} \pm \Gamma_{T_1}^2(v)}{2} \right]^{1/2}, \quad \Gamma_{T_1}(v) = \frac{u^2 + 4\Lambda X^2}{4\Lambda^2}, \quad \Gamma_{T_2}(v) = \frac{Hv}{\Lambda}.$$

Підставляючи вирази (5.28) в формулу (5.27), отримаємо аналітичний розв'язок задачі (5.1) - (5.6), який описує температурний розподіл у шарі адсорбенту:

$$\begin{aligned}
T(t, z) = & e^{\frac{uh_g}{2\Lambda}z} \int_0^t \mathcal{W}_T^{in}(t-\tau, z) T_{in}(\tau) d\tau + T_0 e^{\frac{X^2}{H}t} - T_0 e^{\frac{u_2}{2}z} \int_0^t e^{-X^2/Ht(t-\tau)} \mathcal{W}_T^{HX^2}(\tau, z) d\tau - \\
& - \frac{Q\beta}{H} e^{\frac{uh_g}{2\Lambda}z} \left(e^{\frac{X^2}{H}t} - \frac{\beta\gamma}{\beta\gamma - X^2/H} \int_0^t \left(e^{\frac{X^2}{H}(t-\tau)} - e^{-\beta\gamma(t-\tau)} \right) c(\tau, z) d\tau \right) + \\
& + \frac{Q\beta}{H} e^{\frac{uh_g}{2\Lambda}z} \int_0^t \left(\left(1 - \frac{1}{\beta\gamma - X^2/H} \right) \mathcal{W}_T^{HX^2}(\tau, z) + \frac{1}{\beta\gamma - X^2/H} \mathcal{W}_T^{\beta\gamma}(\tau, z) \right) c(\tau, z) d\tau.
\end{aligned} \tag{5.29}$$

Теорема 5.1 (про розв'язність крайової задачі): Якщо виконується умова однозначної розв'язності крайової задачі (5.1) - (5.6), задані і шукані функції є оригіналами по Лапласа за часовою змінною t , то рішення крайової задачі (5.1) - (5.6) існує і єдине і визначається формулами (5.23), (5.24) (5.29).

5.1.3. Комп'ютерне моделювання та аналіз параметрів процесів адсорбції і десорбції цеоліт-каталізаторах систем нейтралізації викидних газів

На основі аналізу міжнародного досвіду одним з ефективних рішень проблеми є технологія включення різних «вуглецевих пасток» на базі нанопористих цеоліт-адсорбентів перед нейтралізатором двигуна, що мають порівняно низьку вартість і компактність [3,4]. Оптимальне проектування таких об'єктів визначається експериментальними і теоретичними дослідженнями кінетики складного комплексу процесів тепломасопереносу, адсорбції і десорбції вуглеводнів, що протікають в мікоро- і макро порах цеолітів каталізаторів [4-6].

Значна частина експериментальних методів, викладених в літературі стосується кількісної оцінки переносу газу через молекулярні сита для вивчення дифузії при сталих температурних режимах в макропорах і мікропорах всередині кристалітів цеоліту з прогнозуванням імітаційних моделей [7-12]. В [13] розроблено новий метод для вимірювання внутрішньої кристалітної дифузії (о-ксилолу) в кристалах NaX на основі хроматографічної кривої десорбції без врахування теплообміну дифузії ложа. В [14] використаний метод імпульсної газової хроматографії для визначення ефективної внутрішньочастинкової дифузії газів (He, Ar и N₂) в молекулярному ситі 5A. В [15] проводилися окремі дослідження адсорбції вуглеводнів в цеолітах, пов'язаних з моделюванням адсорбції і дифузії (циклопропана на X-цеолітах і бутилацетата на Y-цеолітах і Ag-ZSM-5). В [16] вивчався процес адсорбції n-бутану і 1-бутану на ZSM-5 цеоліті з різним співвідношенням Si / Al, а в [17] виконано моделювання процесу адсорбції-десорбції NO на Y-цеолітах.

В [4, 18] акцентувалася увага на необхідності інтенсифікації досліджень адсорбції-десорбції вуглеводнів і парів води в цеолітах в умовах холодного пуску

(сьогоднішній рівень явно недостатній), виконано комплекс експериментальних досліджень і моделювання числовими методами НС-пасток в умовах, близьких до реальних умов експлуатації бензинових двигунів [4].

Авторами виконано моделювання процесів адсорбції і десорбції пропану як основної складової викидів продуктів неповного згоряння в цеолітах ZSM-5 стосовно умов холодного пуску з отриманням високошвидкісних аналітичних рішень методом операційного числення Хевісайда. Даний нанопористий вид адсорбенту рекомендований на основі опублікованих результатів [4, 18], який має кращі адсорбційні властивості завдяки наявності розподіленої мережі каналів різних розмірів, здатних адсорбувати молекули різної природи і є досить стабільним при багаторазових циклах адсорбції-десорбції. Як модельний адсорбат, було обрано пропан, обсяг якого покриває приблизно 30% загального потоку газу, що виходить з двигуна в продовж першої хвилини його роботи [19]. Більш важкі вуглеводні (гексан) на відміну від легких (пропан) нейтралізуються на стадії старту. Легкі вуглеводні пропускаються нейтралізатором до моменту, коли останній не досягне своєї робочої температури [20-22]. Інші сполуки, такі як вода, присутні у вихлопних газах в концентрації близько 10% від обсягу. Дослідження показують, що присутність води призводить до зниження ефективності роботи всіх випробовуваних вузлів і матеріалів [23]

На рис. 5.2 представлені отримані нами залежності приведених концентрацій адсорбтиву в твердій фазі (сумарні концентрації в просторах макро- і мікропор) для стадії адсорбції тривалістю 3 години. Криві 1 і 6 визначають розподіл концентрації адсорбтиву відповідно поблизу входу і виходу з робочої області (експериментальні дані [25]). Значення концентрацій адсорбтиву у вхідному газовому потоці приймалося 2000 ppm. Модельні криві 2-4 визначають зміну «фронту адсорбції» уздовж шару адсорбенту, забезпечуючи збіжність рішення (5.23) при наближенні до заданих вхідної і вихідної умов відповідно.

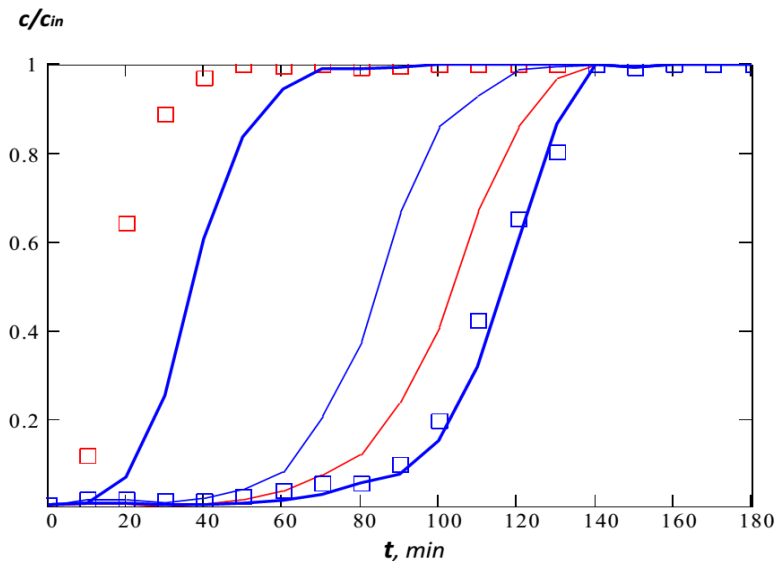


Рис. 5.2. Залежності приведеної концентрації адсорбтиву в твердій фазі для стадії адсорбції (1-вхід, 2,3 вихід; лінія - модель; точки - експеримент)

На рис. 5.3 представлені температурні залежності для стадії десорбції, що змінюються в межах 30-320 °С, що забезпечують досить швидкий режим десорбції. Крива 1 визначає першу крайову умову (5.6). Криві 2, 3 визначають модельну і експериментальну залежності на виході з робочого шару адсорбенту, які з достатньою точністю узгоджуються між собою.

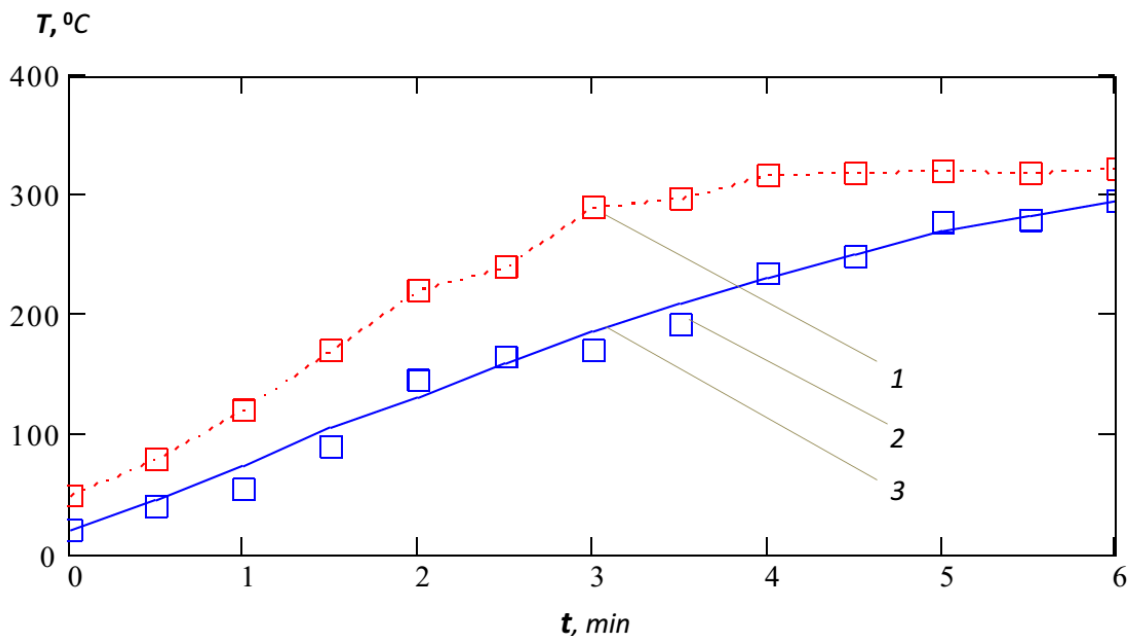


Рис. 5.3. Температурні залежності для стадії десорбції (1-вхід, 2,3 вихід; лінія - модель; точки - експеримент)

На рис. 5.4 представлені залежності концентрацій десорбованої маси з макро- і мікропор адсорбенту на стадії десорбції тривалістю 18 хв. Криві 1, 2 визначають модельну і експериментальну залежності на виході з робочого шару адсорбенту, узгоджуються між собою в заданих межах. Наявність піку (максимуму) кожному з графіків і підвищення концентрації адсорбтива від мінімального значення до максимуму на першому періоді часу стадії десорбції, а потім спадання її на наступному періоді до нуля, свідчить про повне виділення адсорбованої маси з макро- і нанопор робочого шару адсорбенту.

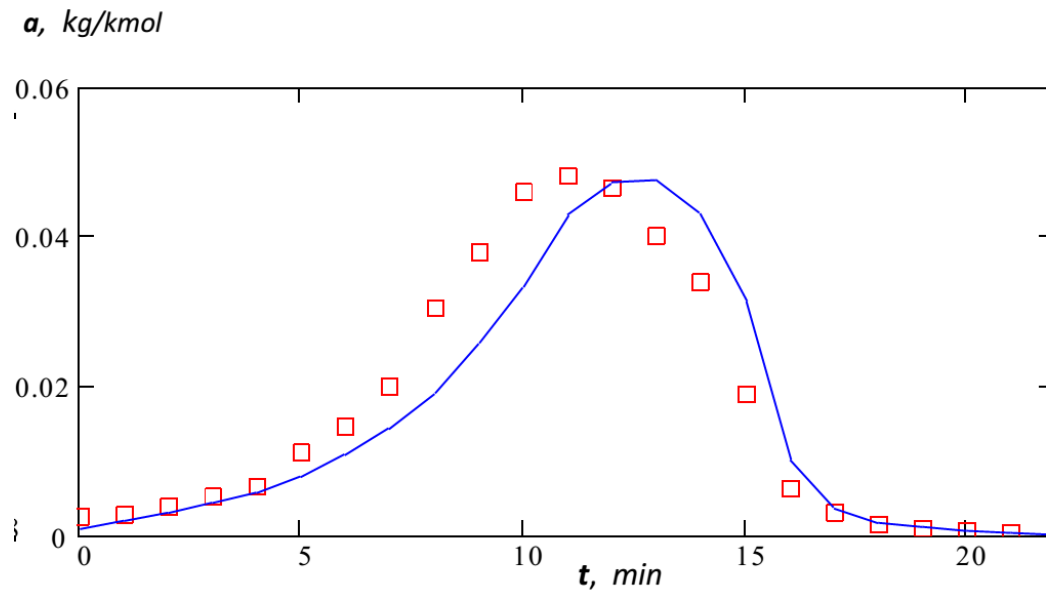


Рис.5.4. Залежність концентрації десорбованої маси з макро- і мікропор адсорбенту на стадії десорбції (лінія-модель; точки - експеримент)

5.1.4 Дегідратація природного газу, як моторного пального. Дослідження та моделювання фаз адсорбції та десорбції

Основними антропогенними джерелами атмосферних забруднювачів є процеси генерації енергії для транспорту та промисловості. Продемонстровано, що транспортний сектор є джерелом викидів, який сьогодні найбільше сприяє глобальному потеплінню, і це ймовірно залишатиметься й найближчим часом [31].

Природний газ є важливим джерелом первинної енергії. Його використання в якості моторного палива для транспорту та інших галузей промисловості економить рідкі нафтопродукти, значно покращує вміст атмосфери і гальмує процес глобального потепління. Проте, надійність експлуатації технологічного обладнання, у тому числі двигунів транспортних засобів, що працюють на природному газі, значною мірою залежить від якості газу, що використовується як

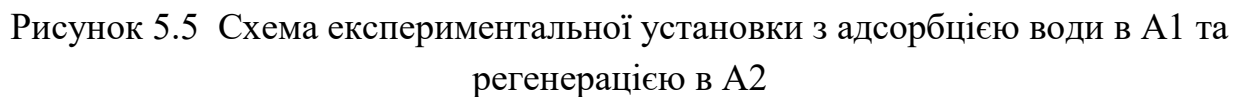
паливо. Це має відповідати вимогам Європейського Союзу, що регулюють безпеку відповідного технічного обладнання [32,33].

У звичайних умовах виробництва, природний газ містить водяну пару. Тому для надійної експлуатації транспортних засобів взимку при температурах до -30°C прийнято, що вміст вологості газу не повинен перевищувати $0,009\text{ г/м}^3$, що відповідає точці роси -60°C в нормальних умовах [34].

В літературі доступна інформація по звичайних системах зневоднення газу, включаючи тверді та рідкі сушарки та холодильні системи [35-38]. Зокрема в [38] порівнювали різні способи зневоднення природного газу, які широко застосовуються в промисловості, відповідно до їх енергетичних вимог та придатності для використання. Вони прийшли до висновку, що адсорбція є кращою, коли потрібна дуже низька температура природного газу. В даний час процеси на адсорбції спираються на технологію, яка використовує високі температури для регенерації адсорбенту [34, 39, 40]. Наприклад, молекулярні сита вимагають великої кількості енергії, щоб нагріти їх до температури регенерації (більше 350°C), а потім охолодити до температури адсорбції ($25-40^{\circ}\text{C}$), збільшуючи витрати на газ, що використовується як моторне паливо. Зниження експлуатаційних витрат на сушіння газу можливе за допомогою коротких циклів адсорбції-десорбції та низькотемпературної регенерації адсорбенту. На заводах мікропористий силікагель використовується через його здатність забезпечувати надзвичайно низькі точки роси.

Технологічна схема система зневоднення газу та регенерації адсорбенту представлена на рисунку 5.5. Дві колони мають розміри: висота: 1,65м, діаметр: 0,8м, та заповнені мікропористим силікагелем KSMH (Україна) з наступними характеристиками: - щільність: 720 г/дм^3 ; - питома площа поверхні: $450-600\text{ м}^2/\text{г}$; Діапазон пор: $5 \cdot 10^{-9} - 8 \cdot 10^{-9}\text{ м}$; об'єм пор: $0,6-0,8\text{ мл/г}$; радіус твердих частинок: 1,4-3 мм.

Дегідратований природний газ знаходиться при температурі $10-12^{\circ}\text{C}$ і тиску 25 МПа ; він охолоджує колонку (наприклад, А1 на малюнку) одночасно з адсорбцією води. При відмові А1 концентрація води в газі не повинна перевищувати $0,009\text{ г/м}^3$.



| | |
|---|-----------|
| Температура навколишнього середовища, °C | -5 ... +3 |
| Газ, що надходить на дегідратацію: | |
| - Споживання, м³/г | 1600 |
| - Тиск, МПа | 25.0 |
| - Температура, °C | 10-12 |
| - Вміст вологи, г/м³ | 0.16-0.18 |
| Регенерація адсорбенту: | |
| - Споживання (10-11% від споживання на сушку), м³/г | 155-160 |
| - Тиск, МПа | 1.0-1.2 |
| - Температура, °C | 125-130 |
| - Вміст вологи, г/м³ | 0.00035- |
| | 0.0017 |

241

Таблиці 1. Дослідження проводилося протягом чотирьох годинних циклів дегідратації та регенерації.

Для моделювання циклічних процесів осушки та регенерації вологи з мікропор об'єкту використовується математична модель, описана в підрозділі 5.1.2.

Концентрація вологи газу, що надходить у колону для сушіння адсорбенту (фаза адсорбції) під час циклу дегідратації, наведена на рисунку 5.6. Ці зміни обумовлені незначними коливаннями тиску газу в мережі. Для симуляції використовується відповідна середня вологість на вході, $0,175 \text{ г/м}^3$.

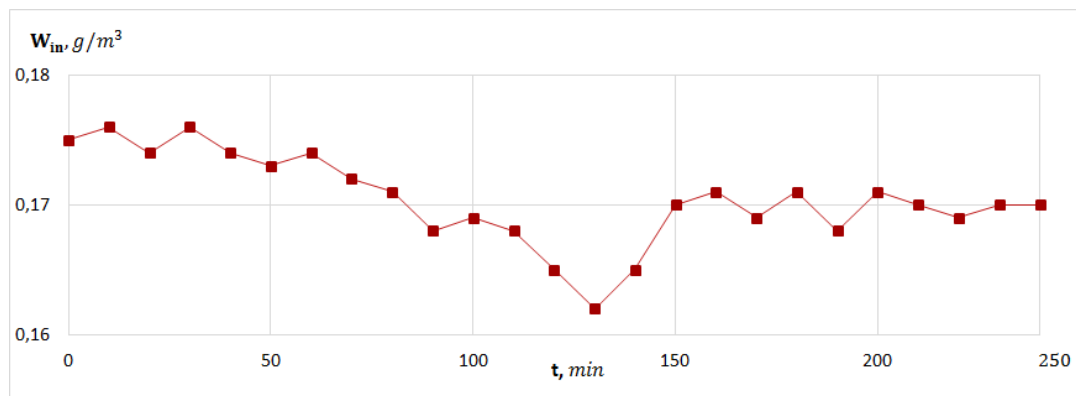


Рисунок 5.6 Експериментальна концентрація вологи на вході адсорбентної колони під час адсорбційної фази

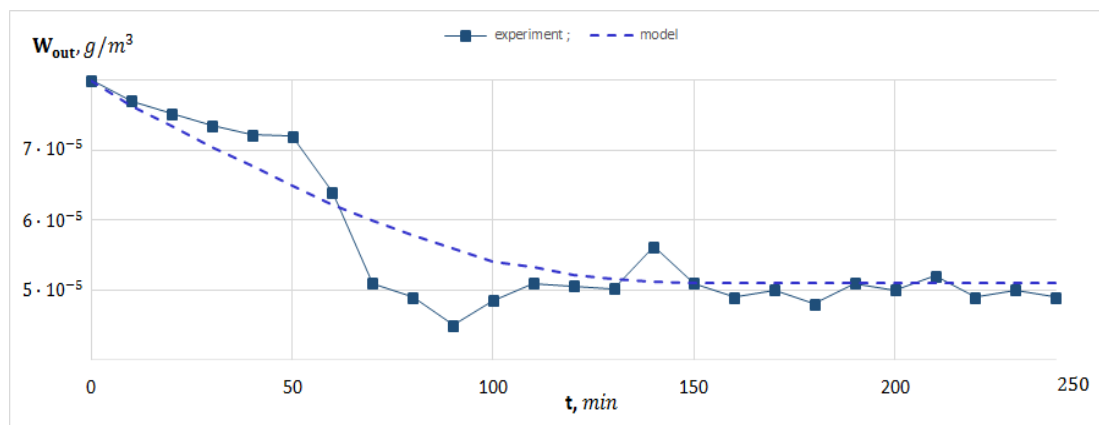


Рисунок 5.7. Вміст вологи зневодненого газу на виході адсорбентної колони

На рисунку 5.7 показано варіації вологості відносно часу дегідратованого газу на виході адсорбентної колони. Середня концентрація (використовується для моделювання) не перевищує $0,003 \text{ г/м}^3$, що відповідає технічним вимогам якості газу для його подальшого використання як моторного палива [40].

Регенерація адсорбції (фаза десорбції) проводиться з невеликою часткою дегідратованого газу (10% у наших експериментах), що нагрівається при 125-

130°C. На рисунку 5.8 показано варіацію температури біля вхідного отвору T_{in} (T_1 , T_2) та вихідного отвору T_{out} (T_3 , T_4) колони під час фази десорбції.

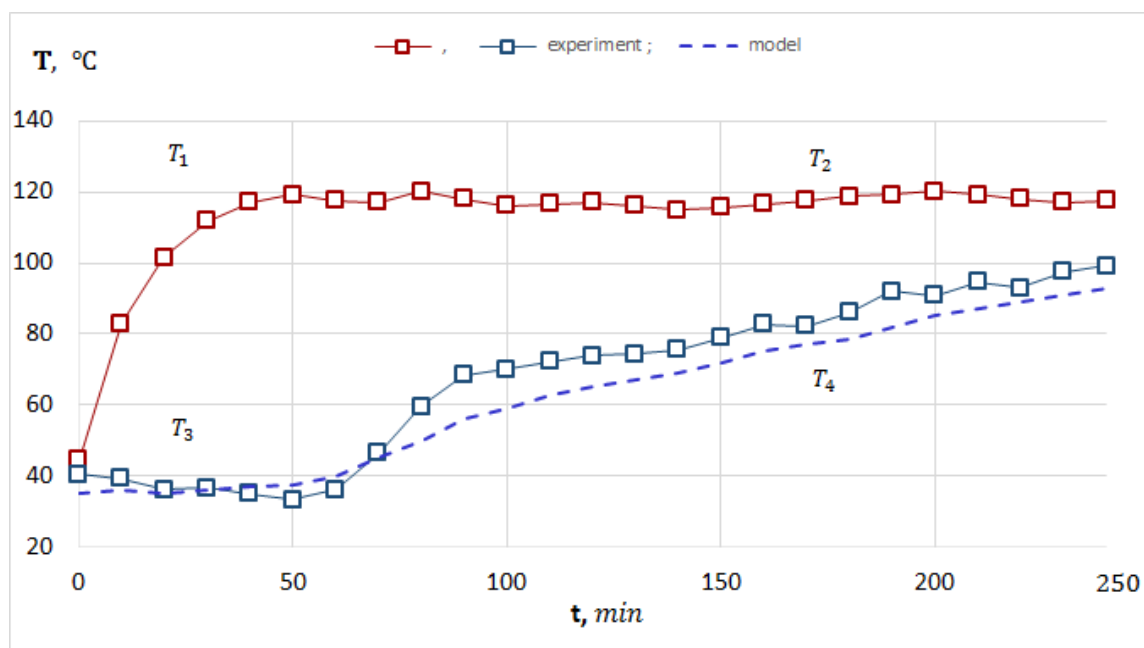


Рисунок 5.8 Температура газу на вхідні T_{in} (T_1 , T_2) та на виході T_{out} (T_3 , T_4) колонки регенерації

Зміна вологості газу на виході з колонці регенерації (рис.5.9) показує кінетику внутрішньої десорбції вологи протягом 240 хвилин.

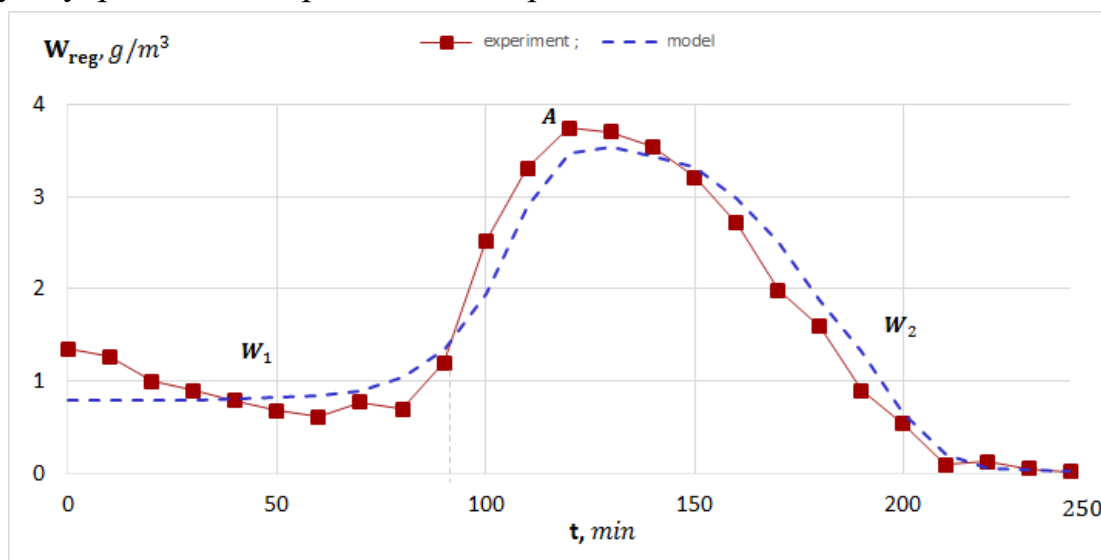


Рисунок 5.9 Вологість газу на виході колонки під час регенерації адсорбенту протягом 240 хвилин

На рисунках 5.8 та 5.9 показано, що процес регенерації характеризується двома окремими періодами: нагрівання адсорбенту, що відповідає приблизно

першим 90 хвилин (рис 5.8, криві T_1 і T_3 , рис.5, крива w_1) та періоду регенерації (Рис 5.8, криві T_2 і T_4 , рис 5.9, крива w_2). На початку регенерації, під час підігріву ложа, десорбція води невелика (вміст вологи в регенованому газі становить 0,5-0,9 г/м³), а середня температура газу на виході з колони досягає 30-50°C. Далі йде більш висока і стабільна температура $T_{in} \approx 120-125^\circ\text{C}$, і T_{out} постійно збільшується. Через приблизно 90 хвилин спостерігається різке збільшення десорбції з максимумом приблизно 120 хвилин (рис.5.9, точка А = 3,75 г/м³) через зникнення води, яка злегка фізично поглинута адсорбентом. Тоді середня концентрація вологи газу різко зменшується і становить 0,50-0,2 г/м³ після приблизно 200 хвилин. Наприкінці циклу регенерації (240 хвилин) ця концентрація незначна (менше 0,005 г/м³)

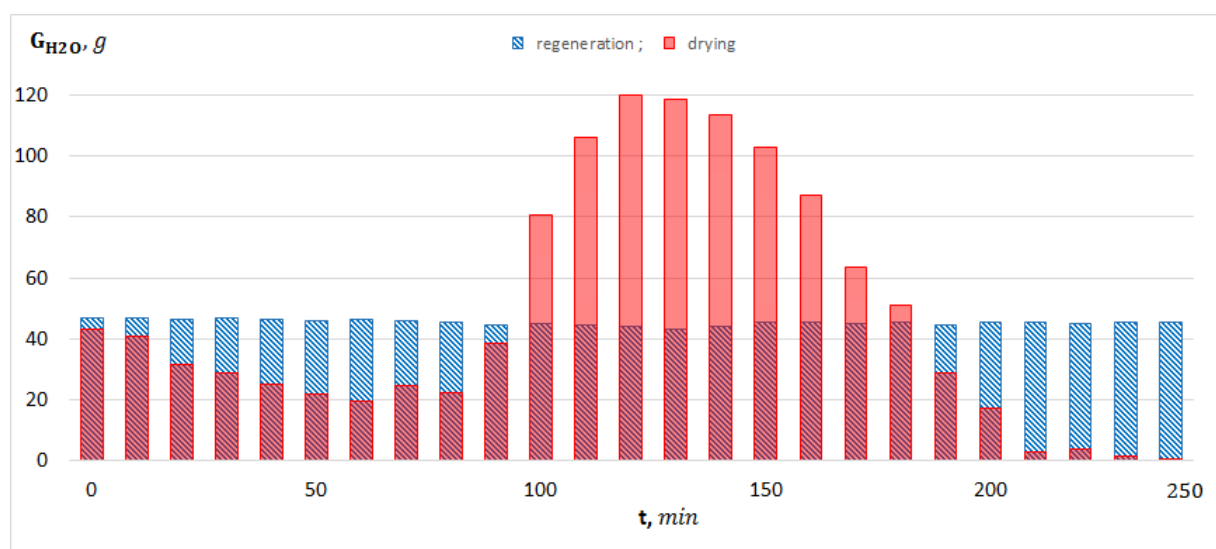


Рисунок 5.10 Варіація кількості адсорбованої та десорбованої води протягом чотирьох годинного циклу

На рисунку 5.10 показано кількість адсорбованої та десорбованої води під час чотирогодинного циклу "сушка-регенерація". За цей час адсорбується 1089 г води та 1067 г усунено, тому в адсорбенті залишається 22 г вологості, тобто приблизно 2% адсорбованої вологи. Ця дуже маленька різниця може відповідати або експериментальним похибкам, або утворенню небагатьох стабільних ОН-груп на найвищій температурі. Якою б не була причина, це доводить, що цей процес добре функціонує.

5.2. Моделювання адсорбції і десорбції вуглеводнів в нанопористих каталізаторах систем нейтралізації викидних газів з використанням нелінійної ізотерми Ленгмюра

В цьому підрозділі викладені теоретичні основи моделювання неізотермічних адсорбції і десорбції в нанопористих каталізаторах для нелінійної ізотерми, отриманої американським фізиком, Нобелівським лауреатом Ервіном Ленгмюром, яка найбільш повно визначає механізм адсорбційної рівноваги для систем мікро- і нанопор класу цеолітів ZSM-5 з отриманням операційним методом Хевисайда високошвидкісних аналітичних рішень, що підвищують якість розпаралелювання обчислень.

5.2.1. Нелінійна математична модель неізотермічної адсорбції та десорбції в середовищі мікропористих частинок

Загальний опис взаємодії дифундуючого газового потоку в біпористій системі пор каталітичного середовища нанопористих частинок з урахуванням основних факторів, що лімітують внутрішню кінетики масопереносу, включаючи взаємодію мікро- і макропереносу наведено в [44].

Основною гіпотезою, прийнятою при розробці даної моделі є те, що адсорбційна взаємодія між молекулами адсорбтива і активними центрами адсорбції на поверхні поділу фаз в мікро- і нанопорах кристалітів визначається на підставі нелінійної функції адсорбційної рівноваги (adsorption equilibrium) Ленгмюра з урахуванням наступних фізичних передумов [24, 28]:

1. Адсорбція локалізована і викликана силами, близькими до хімічних: дисперсійним силам, взаємодію яких встановлено Ленардом і електростатичними силами тяжіння і відштовхування, механізм яких описаний Ван-дер- Вальсом [24].
2. Адсорбція відбувається в активних центрах на поверхні адсорбенту, розподілених по всій внутрішній поверхні мікро- і нанопор.
3. Кожен активний центр адсорбує тільки одну молекулу адсорбтиву і на поверхні мікропори утворюється молекулярний шар адсорбату.
4. Адсорбовані молекули утримуються активними центрами протягом певного часу, що залежить від температури.

Виходячи з цього, функція адсорбційної рівноваги (ізотерма адсорбції) типу Ленгмюра, що описує фазовий перехід адсорбтиву з середовища рухомого газового потоку в мікро- і нанопори частинок шару, буде визначатися нелінійною залежністю, яка встановлює зв'язок між рівноважною концентрацією c_{eq} і

величиною адсорбції a (концентрацією адсорбату в мікро- і нанопорах середовища) [24]

$$a \equiv f(c_{eq}) = a_{full} \frac{bc_{eq}}{1 + bc_{eq}}. \quad (5.31)$$

Тут a_{full} , $0 < b < 1$ - емпіричні коефіцієнти, що залежать від властивостей нанопористого середовища і дифундуючих речовин, a_{full} - концентрація (кількість) адсорбату в мікро- і нанопорах цеоліту при повному заповненні центрів адсорбції, моль/гр, b - коефіцієнт, що дорівнює відношенню констант швидкостей десорбції і адсорбції.

Виразивши з (5.31) функцію рівноважної концентрації c_{eq} щодо величини адсорбції a на поверхні розділу фаз, отримаємо

$$c_{eq}(a) = \frac{1}{b} \frac{a}{a_{full} - a}. \quad (5.32)$$

Уточнена таким чином кінетика неізотермічних адсорбції і десорбції для систем нейтралізації вихлопних газів в нанопористих каталізаторах з урахуванням нелінійної функції адсорбційної рівноваги і наведених фізичних обґрунтувань опишеться наступною системою нелінійних диференціальних рівнянь в приватних похідних [24, 28]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial z} &= D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \\ -H \frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T}{\partial z} - Q \frac{\partial a}{\partial t} - X^2 T + \Lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} &= 0, \\ \frac{\partial a}{\partial t} &= \beta \left(c - \frac{1}{b} \frac{a}{a_{full} - a} \right). \end{aligned} \quad (5.33)$$

Початкові умови

а) адсорбція:

$$c(t, z)|_{t=0} = 0,$$

$$T(t, z)|_{t=0} = T_0,$$

б) десорбція:

$$c(t, z)|_{t=0} = c_0, \quad (5.34)$$

$$T(t, z)|_{t=0} = T_0, \quad (5.35)$$

граничные условия:

а) адсорбция:

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0,$$

б) десорбция:

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \quad (5.36)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (5.37)$$

$$T(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad T(t, z)|_{z=0} = T_{in}(t), \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0. \quad (5.38)$$

Тут c, a - концентрації адсорбтива в газовій фазі і адсорбату в мікропорах адсорбенту; T, u - температура і швидкість газового потоку. Позначення і величини інших параметрів наведені в [44].

З огляду на те, що величина $\frac{a}{a_{full}} < 1$, розкладемо вираз (5.32) в ряд

Маклорена [7]:

$$c_{eq}(a) \equiv \varphi(a) = \frac{1}{b} \frac{a/a_{full}}{1 - a/a_{full}} \approx \frac{1}{ba_{full}} a + \frac{1}{b(a_{full})^2} a^2 = \gamma a(t, z) + \varepsilon a^2(t, z), \quad (5.39)$$

де $\gamma = \frac{1}{ba_{full}}$ - константа адсорбції, що описує лінійну складову функції

адсорбційної рівноваги $c_{eq}(a)$ (відповідно до закону Генрі), $\varepsilon = \frac{1}{b(a_{full})^2}$ - малий параметр, що враховує нелінійну складову ізотерми адсорбції.

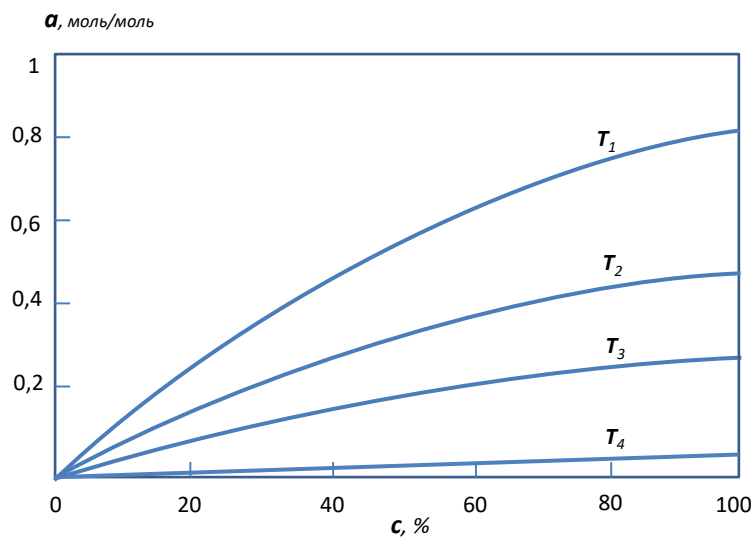


Рисунок 5.11. Типові криві адсорбційної рівноваги для цеоліту ZSM-5

На рис.5.11 наведені типові для нанопористих цеолітів ZSM-5 криві адсорбційної рівноваги (опуклі ізотерми адсорбції) в діапазоні температур адсорбційної середовища від 0 до 350 °C. З рис.5.11 видно, що величина адсорбції a зростає по нелінійному закону $\frac{a/a_{full}}{1 - a/a_{full}}$ по мірі збільшення концентрації

адсорбтива в газовій фазі з, супроводжуючись «заповненням» активних центрів адсорбції на поверхні мікропор і убуває з ростом температури середовища T ($T_1 < T_2 < T_3 < T_4$) [24].

Підставивши розклад виразу (5.39) замість залежності в третє рівняння системи (5.33), отримаємо

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta(c - \gamma a(z, t) - \varepsilon a^2(z, t)). \quad (5.40)$$

5.2.2 Схема лінеаризації нелінійної моделі

Задача (5.33) - (5.38) з урахуванням апроксимованого кінетичного рівняння фазового перетворення (5.40), що містить малий параметр, є змішаною крайовою задачею для нелінійної системи диференціальних рівнянь другого порядку в частинних похідних. Розв'язок задачі (5.33) - (5.38) будемо шукати за допомогою асимптотичних розкладів по малому параметру у вигляді степеневих рядів [25, 45]:

$$\begin{aligned} c(t, z) &= c_0(t, z) + \varepsilon c_1(t, z) + \varepsilon^2 c_2(t, z) + \dots, \\ T(t, z) &= T_0(t, z) + \varepsilon T_1(t, z) + \varepsilon^2 T_2(t, z) + \dots, \\ a(t, z) &= a_0(t, z) + \varepsilon a_1(t, z) + \varepsilon^2 a_2(t, z) + \dots. \end{aligned} \quad (5.41)$$

У результаті підстановки асимптотичної суми (5.41) в рівняння (5.33) з урахуванням (5.40) вихідна нелінійна крайова задача (5.33) - (5.38) розпаралелюється на два типу лінеаризованих крайових задач [25]:

Задача A_0 (нульове наближення з початковими і крайовими умовами вихідної задачі): знайти обмежений в області $D = \{(t, z): t > 0, z \in (0, \infty)\}$ розв'язок системи рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial c_0(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_0(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_0}{\partial x} = D_{inter} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \quad (5.42)$$

$$-H \frac{\partial T_0(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T_0}{\partial z} - Q \frac{\partial a_0}{\partial t} - X^2 T_0 + \Lambda \frac{\partial^2 T_0}{\partial z^2} = 0, \quad (5.43)$$

$$\frac{\partial a_0}{\partial t} = \beta(c_0 - \gamma a_0). \quad (5.44)$$

Початкові умови

а) адсорбція:

$$c_0(t, z)|_{t=0} = 0,$$

$$T_0(t, z)|_{t=0} = T_0^0,$$

б) десорбція:

$$c_0(t, z)|_{t=0} = c_0^0, \quad (5.45)$$

$$T_0(t, z)|_{t=0} = T_0^0, \quad (5.46)$$

граничні умови:

а) адсорбція:

$$c_0(t, z)|_{z=0} = c_{in},$$

б) десорбція:

$$c_0(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \quad (5.47)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c_0(t, z) \big|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} c_0(t, z) \big|_{z=\infty} = 0, \quad (5.48)$$

$$T_0(t, z) \big|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0(t, z) \big|_{z=\infty} = 0, \quad T_0(t, z) \big|_{z=0} = T_{in}(t), \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0(t, z) \big|_{z=\infty} = 0. \quad (5.49)$$

Задача $A_n; n = \overline{1, \infty}$ (n -е наближення з нульовими початковими і крайовими умовами): побудувати в області D обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial c_n(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_n(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_n}{\partial z} = D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c_n}{\partial z^2}, \quad (5.50)$$

$$-H \frac{\partial T_n(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T_n}{\partial z} - Q \frac{\partial a_n}{\partial t} - X^2 T_n + \Lambda \frac{\partial^2 T_n}{\partial z^2} = 0, \quad (5.51)$$

$$\frac{\partial a_n}{\partial t} = \beta \left(c_n - \gamma a_n - \sum_{i=0}^{n-1} a_i(t, z) a_{n-1-i}(t, z) \right) \quad (5.52)$$

з нульовими початковими крайовими умовами.

Задача A_0 є лінійною щодо нульового наближення a_0 ; задача $A_n; n = \overline{1, \infty}$ лінійна щодо n -го наближення a_n і нелінійної щодо всіх попередніх $n-1$ наближень a_0, \dots, a_{n-1} . Всі рівняння задач $A_n; n = \overline{0, \infty}$ отримані шляхом лінеаризації нелінійного диференціального рівняння внутрішньої кінетики адсорбції за допомогою асимптотичні сум (5.41), групуючи доданки в лівих і правих частинах рівнянь і умов вихідної крайової задачі при однакових ступенях малого параметра ε .

Оскільки в наслідок фізики перенесення:

а) функції $c(t, z)$, $a(t, z)$ і $T(t, z)$ є неперервними разом зі своїми похідними для $t > 0$,

б) для $c(t, z) = a(t, z) = T(t, z) = 0$;

в) $c(t, z)$, $a(t, z)$ і $T(t, z)$ зростають не швидше показникової функції, тобто \exists такі постійні $M_c > 0$, $M_a > 0$, $M_T > 0$ і $S_c \leq 0$, $S_a \leq 0$, $S_T \leq 0$, що для $\forall \tau$ $|c(t, z)| < M_c e^{S_c \tau}$, $|a(t, z)| < M_a e^{S_a \tau}$, $|T(t, z)| < M_T e^{S_T \tau}$ (функції розподілів концентрацій c , a і температури T є обмеженими), отже, задачі A_0 і A_n ефективніше вирішувати операційним методом Гевісайда за часовою змінною t [29, 30].

Визначивши

$$L[c(t, z)] \equiv c^*(p, z) = \int_0^\infty c(t, z) e^{-pt} dt,$$

$$L[T(t, z)] \equiv T^*(p, z) = \int_0^\infty T(t, z) e^{-pt} dt,$$

$$L[a(t, z)] \equiv a^*(p, z) = \int_0^{\infty} a(t, z) e^{-pt} dt, \quad ,$$

де p - комплексний параметр перетворення Лапласа, в зображеннях по Лапласу отримаємо такі крайові задачі A_0^* і A_n^* :

Задача A_0^* : Побудувати обмежений в області $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$ розв'язок системи рівнянь

$$\frac{d^2 c_0^*(p, z)}{dz^2} - u_1 \frac{dc_0^*}{dz} - q_1^2(p) c_0^* = -\mathcal{F}_{c_0}^*(p), \quad (5.53)$$

$$\frac{d^2 T_0^*}{dz^2} - u_2 \frac{dT_0^*}{dz} - q_2^2(p) T_0^* = -\mathcal{F}_{T_0}^*(p), \quad (5.54)$$

$$a_0^*(p, z) = \beta \frac{1}{p + \beta\gamma} c_0^*(p, z), \quad (5.55)$$

граничні умови:

а) адсорбція:

б) десорбція:

$$c^*(p, z)|_{z=0} = c_{in}^*(p), \quad \frac{d}{dz} c^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (5.56)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad c^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} c_{in}, \quad (5.57)$$

$$T^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} T^*(p, z)|_{z=0} = 0, \quad T^*(p, z)|_{z=0} = T_{in}^*(p). \quad (5.58)$$

Задача A_n^* ; $n = \overline{1, \infty}$: побудувати обмежений в області $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$ розв'язок системи рівнянь в частинних похідних

$$\frac{d^2 c_n^*}{dz^2} - u_1 \frac{dc_n^*}{dz} - q_1^2(p) c_n^* = -\mathcal{F}_{c_n}^*(p, z), \quad (5.59)$$

$$\frac{d^2 T_n^*}{dz^2} - u_2 \frac{dT_n^*}{dz} - q_2^2(p) T_n^* = -\mathcal{F}_{T_n}^*(p, z), \quad (5.60)$$

$$a_n^*(p, z) = \beta \frac{1}{p + \beta\gamma} \left(c_n^* - \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right)^* (p, z) \right), \quad (5.61)$$

$$\text{де } u_1 = \frac{u}{D_{\text{inter}}}, \quad q_1^2(p) = \frac{p(p + \beta(\gamma + 1))}{D_{\text{inter}}(p + \beta\gamma)}, \quad q_2^2(p) = \frac{Hp + X^2}{\Delta}, \quad \mathcal{F}_{c_0}^* = \frac{c_0^0}{D_{\text{inter}}},$$

$$\mathcal{F}_{T_0}^*(p) = \frac{1}{\Lambda} \left(HT_0^0 - Q\beta \left(1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) c_0^*(p, z) \right), \quad \mathcal{F}_{c_n}^*(p) = \frac{\beta}{D_{\text{inter}}} \left(1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right)^* (p, z),$$

$$\mathcal{F}_{T_n}^*(p) = -\frac{Q\beta}{\Lambda} \left(1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) \left(c_n^*(p, z) - \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right)^* (p, z) \right).$$

5.2.3 Методика побудови аналітичного розв'язку неоднородної крайової задачі нульового наближення

Фундаментальні системи розв'язки для диференціального рівняння крайової задачі A_0^* (5.56), (5.57) відповідно складають функції $e^{\left(\frac{u_1}{2}+\omega_1(p)\right)z}$, $e^{\left(\frac{u_1}{2}-\omega_1(p)\right)z}$ і $e^{\left(\frac{u_2}{2}+\omega_2(p)\right)z}$, $e^{\left(\frac{u_2}{2}-\omega_2(p)\right)z}$ [29, 30].

$$\text{Тут } \omega_1(p) = \left(\frac{u_1^2}{4} + q_1^2(p)\right)^{1/2}, \quad \omega_2(p) = \left(\frac{u_2^2}{4} + q_2^2(p)\right)^{1/2}, \quad \operatorname{Re} \omega_1 > 0, \operatorname{Re} \omega_2 > 0.$$

Фіксуємо для функції $c_0^*(p, z)$ гілку $\operatorname{Re} \omega_1(p) > 0$, а для $T_0^*(p, z)$ $\operatorname{Re} \omega_2(p) > 0$, рішення крайової задачі A_0^* будемо методом функції Коши [3, 10]:

$$c_0^*(p, z) = c_{in}^*(p) e^{\left(\frac{u_1}{2}-\omega_1(p)\right)z} + \frac{c_0^0}{D_{inter}} \frac{1}{2\omega_1(p)} \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} \left(e^{-\omega_1(p)|z-\xi|} - e^{-\omega_1(p)(z+\xi)} \right) d\xi, \quad (5.62)$$

$$T_0^*(p, z) = p T_{in}^*(p) \frac{e^{\left(\frac{u_2}{2}-\omega_2(p)\right)z}}{p} + \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(\frac{e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-\omega_2(p)(z+\xi)}}{2\omega_2(p)} \right) \mathcal{F}_{T_0}^*(p, z, \xi) d\xi, \quad (5.63)$$

Після інтегрування другої складової в (5.62), отримаємо:

$$c_0^*(p, z) = (p c_{in}^*(p)) e^{\frac{u_1}{2}z} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} + c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma+1} \left(\frac{1}{p} + \frac{1}{p+\beta(\gamma+1)} - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u_1}{2}z} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right) + c_0^0 \frac{\beta}{(p+\beta(\gamma+1))} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} e^{\frac{u_1}{2}z}. \quad (5.64)$$

Застосовуючи до формул (5.63), (5.64) інтегральних оператор зворотного перетворення Лапласа $L^{-1}[\dots](p, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty} \dots(p, z) e^{pt} dt$, отримуємо формули обернення для визначення розподілів концентрації адсорбтива в газовій фазі $c_0(t, z)$, температури шару $T_0(t, z)$ і концентрації адсорбату (поглиненої речовини) в нанопори частинок адсорбенту $a_0(t, z)$:

$$c_0(t, z) = e^{\frac{u_1}{2}z} L^{-1} \left[p c_{in}^*(p) \right] * L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right] + c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma+1} \left(L^{-1} \left[\frac{1}{p} \right] + L^{-1} \left[\frac{1}{p+\beta(1+\gamma)} \right] - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u_1}{2}z} L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right] \right) + c_0^0 \beta L^{-1} \left[\frac{1}{p+\beta(\gamma+1)} \right] * L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right] e^{\frac{u_1}{2}z}, \quad (5.65)$$

$$T_0(t, z) = e^{\frac{u_2}{2}z} L^{-1} \left[p T_{in}^*(p) \right] * L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)z}}{p} \right] + \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}}{2\omega_2(p)} \right] - L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)(z+\xi)}}{2\omega_2(p)} \right] \right) * L^{-1} \left[\mathcal{F}_{T_0}^*(p, z, \xi) \right] d\xi, \quad (5.66)$$

$$a_0(t, z) = L^{-1} \left[\frac{\beta}{p + \gamma\beta} \right] * c_0(t, z). \quad (5.67)$$

Тут L^{-1} - символ інтегрального оператора зворотного перетворення Лапласа, i - уявна одиниця, $*$ - символ оператора згортки двох функцій.

Обчислення оригіналів компонентів виразу (5.65)-(5.67). Особливі точки функцій:

для $\frac{e^{-\omega(p)z}}{p}$ - полюс першого порядку $p=0$ і точки галуження $p=\infty$ і

$$p_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[\beta(\gamma+1) + \frac{1}{4} \frac{u^2}{D_{\text{inter}}} \pm \sqrt{\left(\beta(\gamma+1) + \frac{1}{4} \frac{u^2}{D_{\text{inter}}} \right)^2 - \beta\gamma \frac{u^2}{D_{\text{inter}}}} \right] < 0; \text{ для } \frac{e^{-\omega_2(p)z}}{p} - \text{полюс}$$

першого порядку $p=0$ і точки галуження $p=\infty$ і $p_1 = -\frac{1}{H} \left(\frac{(uh_g)^2}{4\Lambda} + X^2 \right) < 0$, де

$\omega_1(p)=0$, $\omega_2(p)=0$. Це дозволяє відповідно до теореми Коші при обчисленні інтегралів по контуру Бромвіча в $L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right]$, $L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{2\omega_1(p)} \right]$, $L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)z}}{p} \right]$, $L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)z}}{2\omega_2(p)} \right]$ перейти від інтегрування на прямій $\text{Re } p = \sigma_0 > 0$ до інтегрування на уявній осі ($\text{Re } p = 0$) [30]:

$$\Phi_c^0(t, z) \equiv L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty} \frac{e^{-\omega(p)z}}{p} e^{pt} dp = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\phi_1(v)z} \frac{\sin(vt - z\phi_2(v)^2)}{v} dv + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}, \quad (5.68)$$

$$\Phi_c(t, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\phi_1(v) \cos(vt - \phi_2(v)z) + \phi_2(v) \sin(vt - \phi_2(v)z)}{(\Gamma_1^2(v) + v^2 \Gamma_2^2(v))^{1/2}} dv. \quad (5.69)$$

Аналогічно обчислюються решта оригіналів

$$\Phi_T^0(t, z) \equiv L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\phi_1(v)z} \frac{\sin(vt - z\phi_2(v)^2)}{v} dv + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}, \quad (5.70)$$

$$\Phi_T(t, z) \equiv L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)z}}{2\omega_2(p)} \right] = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\phi_1(v) \cos(vt - \phi_2(v)z) + \phi_2(v) \sin(vt - \phi_2(v)z)}{(\Gamma_{T_1}^2(v) + v^2 \Gamma_{T_2}^2(v))^{1/2}} dv, \quad (5.71)$$

$$L^{-1}\left[\frac{1}{2\omega_2(p)}e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)}e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}\right]=\frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty}\frac{1}{2\omega_2(p)}e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)}e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}e^{pt}dp\equiv e^{\frac{1}{2}u_2(z-\xi)}\Phi_T(t,|z-\xi|),$$

$$L^{-1}\left[\frac{1}{2\omega_2(p)}e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)}e^{-\omega_2(p)(z+\xi)}\right]\equiv e^{\frac{1}{2}u_2(z-\xi)}\Phi_T(t,z+\xi).$$

$$\text{Тут } \varphi_{1,2}(\nu)=\left[\frac{\left(\Gamma_1^2(\nu)+\nu^2\Gamma_2^2(\nu)\right)^{1/2}\pm\Gamma_1^2(\nu)}{2}\right]^{1/2},$$

$$\Gamma_1(\nu)=\frac{u^2}{4D_{\text{inter}}^2}+\frac{\nu^2\beta}{D_{\text{inter}}(\nu^2+\beta^2\gamma^2)}, \quad \Gamma_2(\nu)=\frac{\nu^3+\nu\beta^2(\gamma+1)\gamma}{D_{\text{inter}}(\nu^2+\beta^2\gamma^2)},$$

$$\phi_{1,2}(\nu)=\left[\frac{\left(\Gamma_{T_1}^2(\nu)+\nu^2\Gamma_{T_2}^2(\nu)\right)^{1/2}\pm\Gamma_{T_1}^2(\nu)}{2}\right]^{1/2}, \quad \Gamma_{T_1}(\nu)=\frac{u^2+4\Lambda X^2}{4\Lambda^2}, \quad \Gamma_{T_2}(\nu)=\frac{H\nu}{\Lambda}.$$

Підставляючи вирази (5.68) - (5.71) в формули (5.65) - (5.67), отримаємо аналітичний розв'язок задачі нульового наближення, який описує залежності концентрації адсорбтиву в газовій фазі (міжчастинковий простір), температури і концентрації адсорбату в нанопорах частинок адсорбенту уздовж координати шару каталізатора і в часі для стадій адсорбції ($c_0(t,z)|_{t=0}=0, T^*(p,z)|_{z=0}=\frac{1}{p}T_{in}$) і десорбції ($T^*(p,z)|_{z=0}=T_{in}^*(p)$):

$$\begin{aligned} c_0(t,z) &= c_{in}(0)e^{\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}\Phi_c^0(t,z) + e^{\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}\int_0^t\frac{d}{d\tau}c_{in}(\tau)\Phi_c^0(t-\tau,z)d\tau + \\ &+ c_0^0\frac{\gamma}{1+\gamma}\left(1+\frac{1}{\gamma}e^{-\beta(\gamma+1)t}-\frac{\gamma+1}{\gamma}e^{\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}\Phi_c^0(t,z)\right) + \beta c_0^0e^{\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}\int_0^te^{-\beta(\gamma+1)(t-s)}\Phi_c^0(\tau,z)d\tau \end{aligned} \quad (5.72)$$

$$\begin{aligned} T_0(t,z) &= T_{in}(0)\Phi_T^0(t,z) + \int_0^t\frac{d}{d\tau}T_{in}(\tau)\Phi_T^0(t-\tau,z) + \\ &+ \frac{1}{\Lambda}\int_0^t\int_0^\infty\left[HT_0^0\mathcal{H}_T(t-\tau;z,\xi)-Q\beta\left(\mathcal{H}_T(t-\tau;z,\xi)-\beta\gamma\int_0^{t-\tau}e^{-\beta\gamma(t-\tau-s)}\mathcal{H}_T(\tau-s;z,\xi)ds\right)c_0^*(p,\xi)\right]d\xi d\tau \end{aligned} \quad (5.73)$$

$$a_0(t,z)=\beta\int_0^te^{-\gamma\beta(t-\tau)}c_0(\tau,z)d\tau. \quad (5.74)$$

Якщо $c_{in}=const$, формула (5.72) буде мати вигляд :

$$c_0(t, z) = c_{in} e^{\frac{u_1}{2}z} \Phi_c^0(t, z) + c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma+1} \left(1 + \frac{1}{\gamma} e^{-\beta(\gamma+1)t} - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u_1}{2}z} \Phi_c^0(t, z) \right) + \beta c_0^0 e^{\frac{u_1}{2}z} \int_0^t e^{-\beta(\gamma+1)(t-\tau)} \Phi_c^0(\tau, z) ds .$$

При переході до оригіналу по Лапласа у формулі (5.66) перетворення її першої складової здійснювалося за допомогою інтеграла Дюамеля [30]

$$\mathcal{H}_T(\tau; z, \xi) = e^{-\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(\Phi_T(\tau, |z-\xi|) - \Phi_T(\tau, z+\xi) \right)$$

5.2.4 Методика побудови аналітичних розв'язків неоднорідних крайових задач n -го наближення

Розв'язками $c_n(t, z)$, $T_n(t, z)$, $a_n(t, z)$ задачі A_n^* (5.40)- (5.42) є функції [30, 41]:

$$c_n^*(p, z) = \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} \left(\frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega_1(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega_1(p)} \right) \mathcal{F}_{c_n}^*(p, \xi) d\xi, \quad (5.75)$$

$$T_n^*(p, z) = \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(\frac{e^{-|z-\xi|\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-(z+\xi)\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} \right) \mathcal{F}_{T_n}^*(p, \xi) d\xi \quad (5.76)$$

$$a_n^*(p, z) = \frac{\beta}{p + \gamma\beta} \left[c_n^*(p, z) - \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right)^* (p, z) \right]. \quad (5.77)$$

Підставляючи значення $\mathcal{F}_{c_n}^*(p, \xi)$ і $\mathcal{F}_{T_n}^*(p, \xi)$ відповідно у формули (5.75), (5.76) і застосовуючи до формул (5.75) - (5.77) інтегральний оператор зворотного перетворення Лапласа $L^{-1}[\dots]$, отримуємо формули обернення для визначення складових концентрацій $c_n(t, z)$, $a_n(t, z)$ і температури $T_n(t, z)$:

$$c_n(t, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega(p)} \right] * \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right) (\tau, \xi) d\xi - \quad (5.78)$$

$$- \frac{\beta}{D_{inter}} \beta\gamma \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} L^{-1} \left[\frac{1}{p + \beta\gamma} \left(\frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega_1(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega_1(p)} \right) \right] * \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right) (\tau, \xi) d\xi$$

$$T_n(t, z) = \frac{Q\beta}{\Lambda} \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(L^{-1} \left[\frac{e^{-|z-\xi|\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-(z+\xi)\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} \right] * \left(\left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right) (t, \xi) - c_n(t, \xi) \right) d\xi + \right. \\ \left. - \frac{Q\beta}{\Lambda} \beta\gamma \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} L^{-1} \left[\frac{1}{p + \beta\gamma} \left(\frac{e^{-|z-\xi|\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-(z+\xi)\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} \right) \right] * \left(\left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right) (t, \xi) - c_n(t, \xi) \right) d\xi \right. \quad (5.79)$$

$$a_n(t, z) = \beta L^{-1} \left[\frac{1}{p + \beta\gamma} \right] * L^{-1} \left[c_n^*(p, z) - \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right)^* (p, z) \right]. \quad (5.80)$$

Здійснюючи перехід до оригіналів по Лапласа у формулах (5.78) - (5.80), використовуючи отримані формули зворотних перетворень по Лапласа для їх компонентів, отримаємо єдиний розв'язок задачі A_n^* , $n = \overline{1, \infty}$, що описує часово-просторові розподілу концентрацій адсорбтиву в газовій фазі, температури і величини адсорбції (концентрації адсорбтиву в мікро і нанопор частинок адсорбенту) для стадій адсорбції десорбції:

$$c_n(t, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^\tau \int_0^\infty \left[\mathcal{H}_c(t - \tau; z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(\tau-s)} \mathcal{H}_c(s; z, \xi) ds \right] \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right) (\tau, \xi) d\xi d\tau, \quad (5.81)$$

$$T_n(t, z) = \frac{Q\beta}{\Lambda} \int_0^t \int_0^\infty \left[\mathcal{H}_T(t - \tau; z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(t-\tau-s)} \mathcal{H}_T(s; z, \xi) ds \right] \left[\sum_{i=0}^{n-1} a_i(s, \xi) a_{n-1-i}(s, \xi) - c_n(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau, \quad (5.82)$$

$$a_n(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\beta\gamma(t-\tau)} \left(c_n(\tau, z) - \sum_{i=0}^{n-1} a_i(\tau, z) a_{n-1-i}(\tau, z) \right) d\tau. \quad (5.83)$$

Тут $\mathcal{H}_c(\tau; z, \xi) = e^{-\frac{u_1}{2}(z-\xi)} \left(\Phi_c(\tau, |z - \xi|) - \Phi_c(\tau, z + \xi) \right).$

Теорема (про розв'язність лінеаризованої системи крайових задач): Якщо задані і шукані функції крайових задач A_0, A_n , $n = \overline{1, \infty}$ є оригіналами по Лапласа за часовою змінною t і виконуються умови однозначної розв'язності крайових задач в зображеннях по Лапласу A_0^*, A_n^* , $n = \overline{1, \infty}$, то розв'язки системи крайових задач A_0, A_n , $n = \overline{1, \infty}$ існують і єдині і визначаються відповідно формулами (5.72) - (5.74) і (5.81) - (5.83), які є складовими рішення вихідної нелінійної крайової задачі (5.33) - (5.38).

Наслідок 1. Для першого наближення розв'язок нелінійної крайової задачі (5.33) - (5.38) формули (5.81) - (5.83) мають вигляд:

$$c_1(t, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^\tau \int_0^\infty \left[\mathcal{H}_c(t - \tau; z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(\tau-s)} \mathcal{H}_c(s; z, \xi) ds \right] a_0^2(\tau, \xi) d\xi d\tau, \quad (5.84)$$

$$T_1(t, z) = \frac{Q\beta}{\Lambda} \int_0^t \int_0^\infty \left[\mathcal{H}_T(t - \tau; z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(t-\tau-s)} \mathcal{H}_T(s; z, \xi) ds \right] \left[a_0^2(s, \xi) - c_1(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau, \quad (5.85)$$

$$a_1(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\beta \gamma(t-\tau)} (c_1(\tau, z) - a_0^2(\tau, z)) d\tau. \quad (5.86)$$

5.3 Моделювання адсорбції та десорбції вуглеводнів в нанопористих каталітичних цеоліт-середовищах з врахуванням нелінійної ізотерми Ленгмюра та енергії активації адсорбенту

Якість математичних моделей процесів адсорбції та десорбції вуглеводнів у нанопористих каталітичних середовищах визначає ефективність технологічних рішень для нейтралізації та зменшення викидів відпрацьованих газів, що швидко зростає та сприяє глобальному потеплінню [2, 4].

В даний час проводяться численні експериментальні та теоретичні дослідження таких процесів, особливо дослідження щодо удосконалення їх математичних моделей з урахуванням впливу різних факторів, що обмежують внутрішню кінетику адсорбції та десорбції в нанопорах каталітичного середовища [10, 24, 28]. В цьому розділі окреслені теоретичні основи моделювання неізотермічної адсорбції та десорбції в нанопористих каталізаторах для нелінійної ізотерми, яка найбільш повно визначає механізм адсорбційної рівноваги для нанопористих цеоліт систем. Для моделювання використовуються методи операційного числення Heaviside та перетворення Лапласа, що дозволяє отримувати високошвидкісні аналітичні рішення, що підвищують якість комп'ютерного розпаралелювання та моделювання реального процесу.

5.3.1. Нелінійна математична модель неізотермічних адсорбції та десорбції на основі узагальненої ізотерми Ленгмюра

Загальна гіпотеза, прийнята в розробці моделі, полягає в тому, що адсорбційна взаємодія молекул з активними центрами адсорбції на поверхні фазового розділення в нанопорах кристалітів визначається на основі нелінійної адсорбційної рівноваги функції Ленгмюра з урахуванням наступних фізичних припущень [24, 28]:

1. Адсорбція локалізована і обумовлена силами, близькими до хімічних сил: силами дисперсії, взаємодія яких встановлюється законом Ленарда та електростатичними силами тяжіння та відштовхування, механізм дії яких описаний Ван-Дер-Ваальсом [24] .

2. Адсорбція відбувається в активних центрах на поверхні адсорбенту та розподілена по всій внутрішній поверхні мікро- та нанопор.

3. Кожний активний центр адсорбує лише одну молекулу адсорбату, а її молекулярний шар адсорбату формується на поверхні.

4. Адсорбовані молекули зберігаються активними центрами протягом певного часу, залежно від температури.

Виходячи з цього, функція адсорбційної рівноваги (ізотерма адсорбції) типу Ленгмюра, що описує фазовий адаптивний перехід із середовища потоку газу до нанопор шару адсорбції, буде визначатися нелінійною взаємодією, що встановлює зв'язок між концентрацією рівноваги c_{eq} та величиною адсорбції a (концентрація адсорбату в нанопори адсорбенту) [28]

$$a(c_{eq}) = a_{full} \frac{b(T)c_{eq}}{1 + bc_{eq}}. \quad (5.91)$$

Тут ΔH - енергія активації, кДж/моль; R - газова константа, кДж/моль/(м³); a_{full} , $0 < b_0 < 1$, b_0 - емпіричні коефіцієнти, які залежать від властивостей мікропористих адсорбентів та дифузійної речовини: a_{full} - концентрація (кількість) адсорбату в мікропорах цеоліту з повним заповненням адсорбційних центрів, моль/г, b_0 - коефіцієнт рівний співвідношенню констант швидкості десорбції та адсорбції.

Енергія активації, що має фізичний зміст у цій задачі як теплота адсорбції, визначається як:

$$\Delta H = \bar{\phi} - (U_g - U_s) - RT, \quad (5.92)$$

де $U_g - U_s$ різниця між кінетичною енергією молекули адсорбату в газоподібних та адсорбованих станах залежно від природи адсорбованої фази, $\bar{\phi}$ - це величина потенціалу Ленарда-Джонса, усереднена по об'єму пор адсорбенту [8], і є характеристикою цеоліту.

Крім того, оскільки $U_g = \frac{i_g}{2} RT$; $U_s = \frac{i_s}{2} RT$, де i_g, i_s - число ступенів свободи молекул адсорбату у відповідній фазі.

Тоді, використовуючи принцип рівномірного розподілу енергії в ступенях свободи, маємо

$$U_g - U_s = \frac{(i_g - i_s)}{2} RT \quad (5.93)$$

Потенціал Ленарда-Джонса визначається як [8]:

$$\varphi(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

де параметри ε і r залежать від природи молекул адсорбату.

Отримавши з (5.91) рівноважну концентраційну функцію c_{eq} щодо концентрації a на інтерфейсі, отримаємо

$$c_{eq}(a) = \frac{1}{b(T)} \frac{a}{a_{full} - a} \quad (5.95)$$

Остаточно кінетика неізотермічної адсорбції та десорбції в нанопористих цеолітах з урахуванням нелінійної функції адсорбційної рівноваги та даних фізичних обґрунтувань описується наступною системою нелінійних рівнянь в частинних похідних [24]:

$$\frac{\partial c(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \quad (5.96)$$

$$-H \frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T}{\partial z} - Q \frac{\partial a}{\partial t} - X^2 T + \Lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, \quad (5.97)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta \left(c - \frac{1}{b_0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{full} - a} \right). \quad (5.98)$$

Початкові умови:

а) адсорбція:

$$c(t, z)|_{t=0} = 0,$$

$$T(t, z)|_{t=0} = T_0^0,$$

б) десорбція:

$$c(t, z)|_{t=0} = c_0^0, \quad (5.99)$$

$$T(t, z)|_{t=0} = T_0^0, \quad (5.100)$$

Крайові умови:

а) адсорбція:

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0,$$

$$T(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad T(t, z)|_{z=0} = T_{in}(t), \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0. \quad (5.103)$$

б) десорбція:

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \quad (5.101)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (5.102)$$

Символ c_0^0 використовується як для адсорбції так і десорбції, оскільки методика обчислення однакова для обох випадків.

Спочатку отримаємо аналітичний розв'язок рівняння. (5.96) - (5.103), припускаючи умови $c(t, z)|_{z=0} = c_{in} \equiv const$ (адсорбція). А далі узагальнюємо цей розв'язок умовами $c(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t)$ (десорбція).

5.3.2. Схема лінеаризації нелінійної моделі

Виконаємо деякі розклади в ряд елементів нелінійної компоненти $\frac{1}{\exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{full} - a}$ диференціального рівняння (5.98).

Враховуючи що значення $\frac{a}{a_{full}} < 1$, з урахуванням розширення

$$\exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right) = 1 - \frac{R}{\Delta H}T + \left(\frac{R}{\Delta H}\right)^2 T^2 + \dots + \left(-\frac{R}{\Delta H}\right)^n T^n + \dots \quad (5.104)$$

вираз (5.92) представляється серією Макларена, нехтуючи членами менше, ніж другий порядок [45]:

$$\begin{aligned} c_{eq}(a) &= \frac{1}{b(T)} \frac{a / a_{full}}{1 - a / a_{full}} \approx \frac{1 - \frac{R}{\Delta H}T}{b_0 a_{full}} a + \frac{1 - \frac{R}{\Delta H}T}{b_0 (a_{full})^2} a^2 = \\ &= \frac{1}{b_0 a_{full}} a + \frac{1}{b_0 (a_{full})^2} a^2 - \frac{R}{\Delta H} \frac{1}{b_0 a_{full}} aT - \frac{R}{\Delta H} \frac{T}{b_0 (a_{full})^2} a^2 \varepsilon \approx \\ &\approx \gamma a(t, z) + \varepsilon a^2(t, z) - \frac{R}{\Delta H} \varepsilon a(t, z) T(t, z), \end{aligned} \quad (5.105)$$

де $\gamma = \frac{1}{b_0 a_{full}}$ - константа адсорбції, яка описує лінійну складову функції

адсорбційної рівноваги $c_{eq}(a)$ (згідно з законом Генрі), $\varepsilon = \frac{1}{b_0 (a_{full})^2}$ - є малим

параметром, який враховує нелінійний компонент ізотерми адсорбції, $Q = \frac{\Delta H}{M_{ads}}$ - питома теплота адсорбції.

Підставляючи розширений вираз (5.99) замість залежності $c_{eq}(a)$ в третьому рівнянні системи (5.96) - (5.98), отримаємо

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta(c - \gamma a(z, t) - \varepsilon a^2(z, t)) \left(a(t, z) - \frac{R}{\Delta H} T(t, z) \right) \quad (5.106)$$

Перелік умовних позначень:

c - концентрація вологи в газовій фазі в колонці, кг/кг (моль/м³);
 a - концентрація вологи, адсорбованої в твердій фазі, кг/кг;
 T - температура газофазного потоку, К;
 u - швидкість газофазного потоку, м/с;
 ρ_{ads} - щільність адсорбенту, кг/м³;
 M_{ads} - молярна маса адсорбенту, кг/моль;
 D_{inter} - ефективний коефіцієнт поздовжньої дифузії, м²/с;
 Λ - коефіцієнт теплової дифузії вздовж колони, кДж/кг.м²/с;
 h_g - теплоємність газу, кДж /кг К;
 H - загальна теплоємність адсорбенту та газу, кДж/кг К;
 ΔH - енергія активності, кДж/моль;
 $Q = \frac{1}{M_{ads}} \Delta H$ - питома теплоємність сорбції (теплоємність адсорбції), кДж/кг;
 R – радіус твердих частинок адсорбента, м;
 $X^2 = 2\alpha_n / R$ - коефіцієнт втрати тепла через стінку адсорбента, кДж/(кг Кс);
 α_n - коефіцієнт теплопередачі, кДж/(кг к.м.с.)
 γ - постійна Генрі;
 β - коефіцієнт масопередачі, м/с
 z - відстань від вершини ложа для математичного моделювання, м;
 in - індекс параметрів (концентрація, температура) на вході колони.

5.3.3. Методика побудова аналітичного розв'язку неоднородної крайової задачі нульового наближення

Лінеаризована система задач з малим параметром. Проблема (5.96) - (5.103) з урахуванням апроксимаційного кінетичного рівняння фазового перетворення (5.106), що містить малий параметр, є змішаною крайовою задачею для нелінійної системи диференціальних рівнянь в частинних похідних другого порядку. Розв'язок задачі (5.96) - (5.103) буде шукати за допомогою асимптотичних розкладу за малим параметром у вигляді наступних силових рядів [26, 27]:

$$\begin{aligned}
 c(t, z) &= c_0(t, z) + \varepsilon c_1(t, z) + \varepsilon^2 c_2(t, z) + \dots, \\
 T(t, z) &= T_0(t, z) + \varepsilon T_1(t, z) + \varepsilon^2 T_2(t, z) + \dots, \\
 a(t, z) &= a_0(t, z) + \varepsilon a_1(t, z) + \varepsilon^2 a_2(t, z) + \dots
 \end{aligned}
 \tag{5.107}$$

В результаті підстановки асимптотичної суми (5.107) у рівняння (5.96), розглядаючи (5.100) початкова нелінійна крайова задача (5.96) - (5.103) розпаралелюється на два типи лінеаризованих крайових задач [26]:

Задача A_0 (нульове наближення з початковими та граничними умовами початкової задачі): знайти розв'язок в області $D = \{(t, z): t > 0, z \in (0, \infty)\}$ системи рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial c_0(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_0(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_0}{\partial x} = D_{inter} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \quad (5.108)$$

$$-H \frac{\partial T_0(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T_0}{\partial z} - Q \frac{\partial a_0}{\partial t} - X^2 T_0 + \Lambda \frac{\partial^2 T_0}{\partial z^2} = 0, \quad (5.109)$$

$$\frac{\partial a_0}{\partial t} = \beta(c_0 - \gamma a_0). \quad (5.110)$$

Початкові умови:

а) адсорбція:

$$c_0(t, z)|_{t=0} = 0,$$

$$T_0(t, z)|_{t=0} = T_0^0,$$

б) десорбція:

$$c_0(t, z)|_{t=0} = c_0^0, \quad (5.111)$$

$$T_0(t, z)|_{t=0} = T_0^0, \quad (5.112)$$

Крайові умови:

а) адсорбція:

$$c_0(t, z)|_{z=0} = c_{in},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c_0(t, z)|_{z=\infty} = 0,$$

$$T_0(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0(t, z)|_{z=\infty} = 0,$$

б) десорбція:

$$c_0(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \quad (5.113)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c_0(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (5.114)$$

$$T_0(t, z)|_{z=0} = T_{in}(t), \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0(t, z)|_{z=\infty} = 0. \quad (5.115)$$

Задача $A_n; n = \overline{1, \infty}$ (n -го наближення з нульовими початковими та граничними умовами): побудувати в області D обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial c_n(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_n(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_n}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c_n}{\partial z^2}, \quad (5.116)$$

$$-H \frac{\partial T_n(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T_n}{\partial z} - Q \frac{\partial a_n}{\partial t} - X^2 T_n + \Lambda \frac{\partial^2 T_n}{\partial z^2} = 0, \quad (5.117)$$

$$\frac{\partial a_n}{\partial t} = \beta \left(c_n - \gamma a_n - \sum_{i=0}^{n-1} \left(a_i(t, z) \left(a_{n-1-i}(t, z) - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i}(t, z) \right) \right) \right), \quad (5.118)$$

з нульовими початковими граничними умовами.

Задача A_0 лінійна щодо нульового наближення a_0 ; Задача $A_n; n = \overline{1, \infty}$ лінійна щодо n -го апроксимації a_n та нелінійна щодо всіх попередніх наближень a_0, \dots, a_{n-1} .

Побудуємо аналітичні розв'язки задач A_0 та $A_n; n = \overline{1, \infty}$ використовуючи операційний метод Heaviside по часовій змінній t [29, 30].

Визначивши $L[c(t, z)] \equiv c^*(p, z) = \int_0^\infty c(t, z) e^{-pt} dt$,

*Задача A_0^** : побудувати в області $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$ обмежений розв'язок системи рівнянь:

$$\frac{d^2 c_0^*(p, z)}{dz^2} - u_1 \frac{dc_0^*}{dz} - q_1^2(p) c_0^* = -\mathcal{F}_{c_0}^*(p) \quad (5.119)$$

$$\frac{d^2 T_0^*}{dz^2} - u_2 \frac{dT_0^*}{dz} - q_2^2(p) T_0^* = -\mathcal{F}_{T_0}^*(p) \quad (5.120)$$

$$a_0^*(p, z) = \beta \frac{1}{p + \beta\gamma} c_0^*(p, z) \quad (5.121)$$

Крайові умови:

а) адсорбція:

$$c^*(p, z)|_{z=0} = c_{in}^*(p),$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c^*(p, z)|_{z=\infty} = 0,$$

$$T^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} T^*(p, z)|_{z=0} = 0, \quad T^*(p, z)|_{z=0} = T_{in}^*(p). \quad (5.124)$$

б) десорбція:

$$\frac{d}{dz} c^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (5.122)$$

$$c^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} c_{in}, \quad (5.123)$$

Задача A_n^ ; $n = \overline{1, \infty}$* : побудувати в області $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$ обмежений

розв'язок системи рівнянь:

$$\frac{d^2 c_n^*}{dz^2} - u_1 \frac{dc_n^*}{dz} - q_1^2(p) c_n^* = -\mathcal{F}_{c_n}^*(p, z) \quad (5.125)$$

$$\frac{d^2 T_n^*}{dz^2} - u_2 \frac{dT_n^*}{dz} - q_2^2(p) T_n^* = -\mathcal{F}_{T_n}^*(p, z) \quad (5.126)$$

$$a_n^*(p, z) = \beta \frac{1}{p + \beta\gamma} \left(c_n^* - \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right)^* \right) (p, z) \quad (5.127)$$

$$\text{де } u_1 = \frac{u}{D_{\text{inter}}}, \quad q_1^2(p) = \frac{p(p + \beta(\gamma + 1))}{D_{\text{inter}}(p + \beta\gamma)}, \quad q_2^2(p) = \frac{Hp + X^2}{\Lambda},$$

$$\mathcal{F}_{c_0}^* = \frac{c_0^0}{D_{\text{inter}}}, \quad \mathcal{F}_{T_0}^*(p, z) = \frac{1}{\Lambda} \left(HT_0^0 - Q\beta \left(1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) c_0^*(p, z) \right),$$

$$\mathcal{F}_{c_n}^*(p, z) = \frac{\beta}{D_{\text{inter}}} \left(1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* (p, z),$$

$$\mathcal{F}_{T_n}^*(p, z) = -\frac{Q\beta}{\Lambda} \left(1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) \left(c_n^*(p, z) - \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* \right) (p, z).$$

5.3.4. Методика побудови аналітичних розв'язків неоднорідних

Побудуємо розв'язок гетерогенної крайової задачі A_0^* (використовуючи метод Коші) [26, 41, 43]:

$$c_0^*(p, z) = c_{in}^*(p) e^{\left(\frac{u_1}{2} - \omega_1(p)\right)z} + \frac{c_0^0}{D_{inter}} \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} \left(\frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega_1(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega_1(p)} \right) d\xi, \quad (5.128)$$

$$T_0^*(p, z) = p T_{in}^*(p) \frac{e^{\left(\frac{u_2}{2} - \omega_2(p)\right)z}}{p} + \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(\frac{e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-\omega_2(p)(z+\xi)}}{2\omega_2(p)} \right) \mathcal{F}_{T_0}^*(p, z, \xi) d\xi. \quad (5.129)$$

Після інтегрування другого члену в (5.128) отримаємо:

$$c_0^*(p, z) = (p c_{in}^*(p)) e^{\frac{u_1}{2}z} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} + c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma+1} \left(\frac{1}{p} + \frac{1}{p+\beta(\gamma+1)} - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u_1}{2}z} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right) + c_0^0 \frac{\beta}{(p+\beta(\gamma+1))} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} e^{\frac{u_1}{2}z}, \quad (5.130)$$

$$\text{де } \omega_1(p) = \left(\frac{u_1^2}{4} + q_1^2(p) \right)^{1/2}, \quad \omega_2(p) = \left(\frac{u_2^2}{4} + q_2^2(p) \right)^{1/2}, \quad \operatorname{Re} \omega_1 > 0, \quad \operatorname{Re} \omega_2 > 0.$$

Розв'язок неоднорідної крайової задачі A_0^* . Застосовуючи інтегральний оператор зворотного перетворення Лапласа $L^{-1}[\dots^*(p, z)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \dots^*(p, z) e^{pt} dt$ до формул (1.128), (1.129), ми отримуємо зворотні формули для визначення розподілів адсорбційної концентрації в газовій фазі $c_0(t, z)$, температури шару $T_0(t, z)$ та концентрації адсорбату в нанопортах цеоліт $a_0(t, z)$:

$$c_0(t, z) = e^{\frac{u_1}{2}z} L^{-1} \left[p c_{in}^*(p) \right] * L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right] + c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma+1} \left(L^{-1} \left[\frac{1}{p} \right] + L^{-1} \left[\frac{1}{p+\beta(1+\gamma)} \right] - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u_1}{2}z} L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right] \right) + c_0^0 \beta L^{-1} \left[\frac{1}{p+\beta(\gamma+1)} \right] * L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right] e^{\frac{u_1}{2}z} \quad (5.131)$$

$$T_0(t, z) = e^{\frac{u_2}{2}z} L^{-1} \left[p T_{in}^*(p) \right] * L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)z}}{p} \right] + \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}}{2\omega_2(p)} \right] - L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)(z+\xi)}}{2\omega_2(p)} \right] \right) * L^{-1} \left[\mathcal{F}_{T_0}^*(p, z, \xi) \right] d\xi \quad (5.132)$$

$$a_0(t, z) = L^{-1} \left[\frac{\beta}{p + \gamma\beta} \right] * c_0(t, z) \quad (5.133)$$

Тут L^{-1} - символ інтегрального оператора зворотного перетворення Лапласа, i - уявна одиниця, $*$ - символ оператора згортки двох функцій.

Розрахунок оригіналів компонент виразів (5.131) - (5.133)

$$\Phi_c^0(t, z) \equiv L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{e^{-\omega(p)z}}{p} e^{pt} dp = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{-\varphi_1(\nu)z} \frac{\sin(\nu t - z\varphi_2(\nu)^2)}{\nu} d\nu + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}, \quad (5.135)$$

$$\Phi_c(t, z) \equiv L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)z}}{2\omega_1(p)} \right] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{\varphi_1(\nu) \cos(\nu t - \varphi_2(\nu)z) + \varphi_2(\nu) \sin(\nu t - \varphi_2(\nu)z)}{(\Gamma_1^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_2^2(\nu))^{1/2}} d\nu. \quad (5.136)$$

$$\Phi_T^0(t, z) \equiv L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\phi_1(\nu)z} \frac{\sin(\nu t - z\phi_2(\nu)^2)}{\nu} d\nu + e^{-\frac{u}{2D_{\text{inter}}}z}, \quad (5.137)$$

$$\Phi_T(t, z) \equiv L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)z}}{2\omega_2(p)} \right] = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{\phi_1(\nu) \cos(\nu t - \phi_2(\nu)z) + \phi_2(\nu) \sin(\nu t - \phi_2(\nu)z)}{(\Gamma_{T_1}^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_{T_2}^2(\nu))^{1/2}} d\nu, \quad (5.138)$$

$$L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}}{2\omega_2(p)} \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{e^{-\omega_2(p)|z-\xi|}}{2\omega_2(p)} e^{pt} dp \equiv \Phi_T(t, |z-\xi|), \quad L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_2(p)(z+\xi)}}{2\omega_2(p)} \right] \equiv \Phi_T(t, z+\xi).$$

Де

$$\varphi_{1,2}(\nu) = \left[\frac{(\Gamma_1^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_2^2(\nu))^{1/2} \pm \Gamma_1^2(\nu)}{2} \right]^{1/2}, \quad \Gamma_1(\nu) = \frac{u^2}{4D_{\text{inter}}^2} + \frac{\nu^2 \beta}{D_{\text{inter}}^2 (\nu^2 + \beta^2 \gamma^2)},$$

$$\Gamma_2(\nu) = \frac{\nu^3 + \nu \beta^2 (\gamma + 1) \gamma}{D_{\text{inter}} (\nu^2 + \beta^2 \gamma^2)}, \quad \phi_{1,2}(\nu) = \left[\frac{(\Gamma_{T_1}^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_{T_2}^2(\nu))^{1/2} \pm \Gamma_{T_1}^2(\nu)}{2} \right]^{1/2},$$

$$\Gamma_{T_1}(\nu) = \frac{u^2 + 4\Lambda X^2}{4\Lambda^2}, \quad \Gamma_{T_2}(\nu) = \frac{H\nu}{\Lambda}.$$

Застосовуючи вирази (1.35), (1.37), (1.38) до формул (1.131) - (1.133), отримаємо аналітичний розв'язок задачі A_0 нульового наближення, яка описує залежність адсорбційної концентрації в газовій фазі (міжчастинковий простір) температури та концентрації адсорбату в частинках нанопористого цеоліту вздовж координати каталітичного шару та в часі для адсорбції ($c_0(t, z)|_{t=0} = 0$, $c(t, z)|_{z=0} = c_{in}$, $T_0(t, z)|_{z=0} = T_{in}$) та циклів десорбції ($c_0(t, z)|_{t=0} = c_0^0$, $c(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t)$, $T_0(t, z)|_{z=0} = T_{in}(t)$):

$$\begin{aligned}
c_0(t, z) = & c_{in}(0) e^{\frac{u}{2D_{inter}}z} \Phi_c^0(t, z) + e^{\frac{u}{2D_{inter}}z} \int_0^t \frac{d}{d\tau} c_{in}(\tau) \Phi_c^0(t - \tau, z) d\tau + \\
& + c_0^0 \frac{\gamma}{1 + \gamma} \left(1 + \frac{1}{\gamma} e^{-\beta(\gamma+1)t} - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u}{2D_{inter}}z} \Phi_c^0(t, z) \right) + \beta c_0^0 e^{\frac{u}{2D_{inter}}z} \int_0^t e^{-\beta(\gamma+1)(t-s)} \Phi_c^0(\tau, z) d\tau
\end{aligned} \quad (5.139)$$

$$\begin{aligned}
T_0(t, z) = & T_{in}(0) \Phi_T^0(t, z) + \int_0^t \frac{d}{d\tau} T_{in}(\tau) \Phi_T^0(t - \tau, z) + \\
& + \frac{1}{\Lambda} \int_0^t \int_0^\infty \left[HT_0^0 \mathcal{H}_T(t - \tau; z, \xi) - Q\beta \left(\mathcal{H}_T(t - \tau; z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(t-\tau-s)} \mathcal{H}_T(\tau - s; z, \xi) ds \right) c_0^*(p, \xi) \right] d\xi d\tau
\end{aligned} \quad (5.140)$$

$$a_0(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\gamma\beta(t-\tau)} c_0(\tau, z) d\tau \quad (5.141)$$

Якщо $c_{in} = const$, то формула (5.139) набуде вигляду:

$$\begin{aligned}
c_0(t, z) = & c_{in} e^{\frac{u_1}{2}z} \Phi_c^0(t, z) + c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma+1} \left(1 + \frac{1}{\gamma} e^{-\beta(\gamma+1)t} - \frac{\gamma+1}{\gamma} e^{\frac{u_1}{2}z} \Phi_c^0(t, z) \right) \\
& + \beta c_0^0 e^{\frac{u_1}{2}z} \int_0^t e^{-\beta(\gamma+1)(t-\tau)} \Phi_c^0(\tau, z) d\tau
\end{aligned} \quad (5.142)$$

При переході до оригіналу Лапласа в формулі (5.131) перетворення першої компоненти здійснюється з використанням інтеграла Дуамеля [30].

$$\text{Де } \mathcal{H}_T(\tau; z, \xi) = e^{-\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(\Phi_T(\tau, |z-\xi|) - \Phi_T(\tau, z+\xi) \right).$$

Розв'язок неоднорідної крайової задачі A_n^* , $n = \overline{1, \infty}$. Розв'язки $c_n(t, z)$, $T_n(t, z)$, $a_n(t, z)$ задач (5.110) - (5.112) є функціями [11, 13]:

$$c_n^*(p, z) = \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} \left(\frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega_1(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega_1(p)} \right) \mathcal{F}_{c_n}^*(p, \xi) d\xi \quad (5.142)$$

$$T_n^*(p, z) = \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(\frac{e^{-|z-\xi|\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-(z+\xi)\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} \right) \mathcal{F}_{T_n}^*(p, \xi) d\xi \quad (5.143)$$

$$a_n^*(p, z) = \frac{\beta}{p + \gamma\beta} \left[c_n^*(p, z) - \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* (p, z) \right] \quad (5.144)$$

Підставляючи значення $\mathcal{F}_{c_n}^*(p, \xi)$ і $\mathcal{F}_{T_n}^*(p, \xi)$ відповідно в рівняння (5.142), (1.143) і застосовуючи інтегральний оператор зворотного перетворення Лапласа

до формул (1.142) - (1.144), отримаємо формули зворотного перетворення для визначення n -го наближення для розподілів концентрацій $c_n(t, z)$, $a_n(t, z)$ і розподіл температур $T_n(t, z)$ у шарі:

$$c_n(t, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega(p)} \right] * \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right) (\tau, \xi) d\xi -$$

$$- \frac{\beta}{D_{inter}} \beta \gamma \int_0^\infty e^{\frac{u_1}{2}(z-\xi)} L^{-1} \left[\frac{1}{p + \beta \gamma} \left(\frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega_1(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega_1(p)} \right) \right] * \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right) (\tau, \xi) d\xi$$

$$(5.145)$$

$$T_n(t, z) = \frac{Q\beta}{\Lambda} \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} \left(L^{-1} \left[\frac{e^{-|z-\xi|\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-(z+\xi)\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} \right] * \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right) (t, \xi) - c_n(t, \xi) \right) d\xi +$$

$$- \frac{Q\beta}{\Lambda} \beta \gamma \int_0^\infty e^{\frac{u_2}{2}(z-\xi)} L^{-1} \left[\frac{1}{p + \beta \gamma} \left(\frac{e^{-|z-\xi|\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-(z+\xi)\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} \right) \right] * \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right) (t, \xi) - c_n(t, \xi) d\xi$$

$$(5.146)$$

$$a_n(t, z) = \beta L^{-1} \left[\frac{1}{p + \beta \gamma} \right] * L^{-1} \left[c_n^*(p, z) - \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^*(p, z) \right]$$

$$(5.147)$$

У формулах (5.145) - (5.147) з використанням зворотних перетворень Лапласа (1.136), (1.138) для їх компонентів ми одержуємо аналітичний розв'язок задачі A_n^* , $n = \overline{1, \infty}$, що описує часткові просторові розподіли n -го наближення адсорбційних згущень у газової фази $c_n(t, z)$, температури $T_n(t, z)$ та адсорбції (концентрація адсорбату в нанопорах частинок) $a_n(t, z)$ для етапу десорбції [26, 30]:

$$c_n(t, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^\tau \int_0^\infty \left[\mathcal{H}_c(t - \tau; z, \xi) - \beta \gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta \gamma(t-s)} \mathcal{H}_c(s; z, \xi) ds \right] \left(\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right) (\tau, \xi) d\xi d\tau$$

$$(5.148)$$

$$T_n(t, z) = \frac{Q\beta}{\Lambda} \int_0^t \int_0^\infty \left[\mathcal{H}_T(t - \tau; z, \xi) - \beta \gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta \gamma(t-s)} \mathcal{H}_T(s; z, \xi) ds \right] \left[\sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) (s, \xi) - c_n(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau$$

$$(5.149)$$

$$a_n(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\beta \gamma(t-\tau)} \left(c_n(\tau, z) - \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left(a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) (\tau, z) \right) d\tau$$

$$(5.150)$$

де $\mathcal{H}_c(\tau; z, \xi) = e^{-\frac{u_1}{2}(z-\xi)} \left(\Phi_c(\tau, |z - \xi|) - \Phi_c(\tau, z + \xi) \right)$.

Для першого наближення розв'язку нелінійної крайової задачі (5.93) - (5.98) формули (5.148) - (5.150) набувають вигляду:

$$\begin{aligned}
c_1(t, z) &= \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^t \int_0^\infty \left[\mathcal{H}_c(t-\tau; z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(\tau-s)} \mathcal{H}_c(s; z, \xi) ds \right] a_0(\tau, \xi) \left(a_0(\tau, z) - \frac{R}{\Delta H} T_0(\tau, z) \right) d\xi d\tau \\
T_1(t, z) &= \frac{Q\beta}{\Lambda} \int_0^t \int_0^\infty \left[\mathcal{H}_T(t-\tau; z, \xi) - \beta\gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(\tau-s)} \mathcal{H}_T(s; z, \xi) ds \right] \left[a_0(\tau, \xi) \left(a_0(\tau, z) - \frac{R}{\Delta H} T_0(\tau, z) \right) - c_1(\tau, \xi) \right] d\xi d\tau \\
a_1(t, z) &= \beta \int_0^t e^{-\beta\gamma(t-\tau)} \left(c_1(\tau, z) - a_0(\tau, z) \left(a_0(\tau, z) - \frac{R}{\Delta H} T_0(\tau, z) \right) \right) d\tau
\end{aligned}$$

5.3.5. Комп'ютерне моделювання. Аналіз розподілів концентрації адсорбтиву в газовій фазі і нанопорах цеоліту та температур

Метою комп'ютерного моделювання було вивчення можливостей моделі, запропонованої для її подальшого використання в технологіях очищення викидів вуглецю в атмосферу енергетичними та транспортними об'єктами (пропан, CO₂ та інші продукти згоряння). Сьогодні це один із ключових способів вирішення проблем глобального потепління та створення безпечної енергетичної стратегії [2].

В якості адсорбату було обрано пропан, обсяг якого охоплює близько 30% загального потоку газу, що виходить з двигуна автомобіля протягом першої хвилини його експлуатації [4].

Використовуючи розроблену теорію, проведено моделювання та обчислення концентраційних залежностей неізотермічних кривих адсорбції та десорбції в нанопорошкових каталітичних пластах. Розрахунки проводились для експериментального зразка [42]. Геометричні розміри зразка: довжина - $l = 1,5 \cdot 10^{-2}$ м, радіус $R = 0,45 \cdot 10^{-2}$ м. Фізичні параметри цеоліту відомі з літератури [24, 28].

На рис.5.12 показано логарифмічну залежність похибки $\sigma = |c_{n+1}(t, z) - c_n(t, z)| / c_n(t, z)$ при обчисленні концентрації як функції від числа наближення.

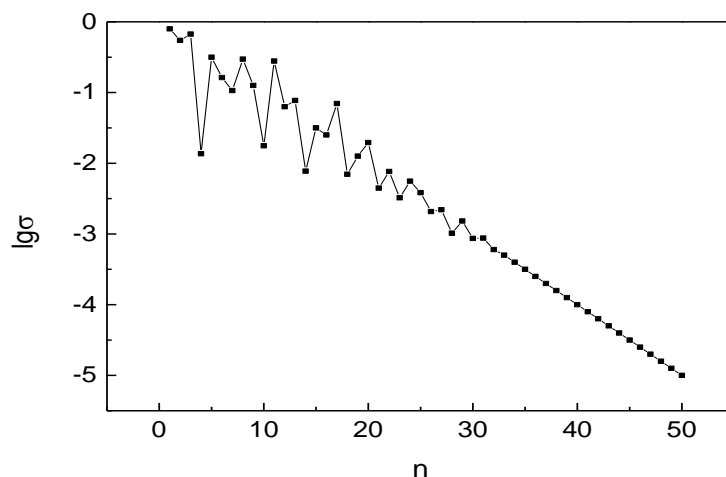


Рисунок 5.12 Конвергенція похибки розрахунку концентрації адсорбату в газовій фазі

З рис.5.12 видно, що помилка, прийнята в наступних розрахунках $\sigma = 10^{-5}$, досягається апроксимацією $n \approx 50$.

На рис.5.13 показані результати розрахунку ізотерм адсорбції для пропану при різних температурах: (використовуючи рівняння (5.140), (5.149)).

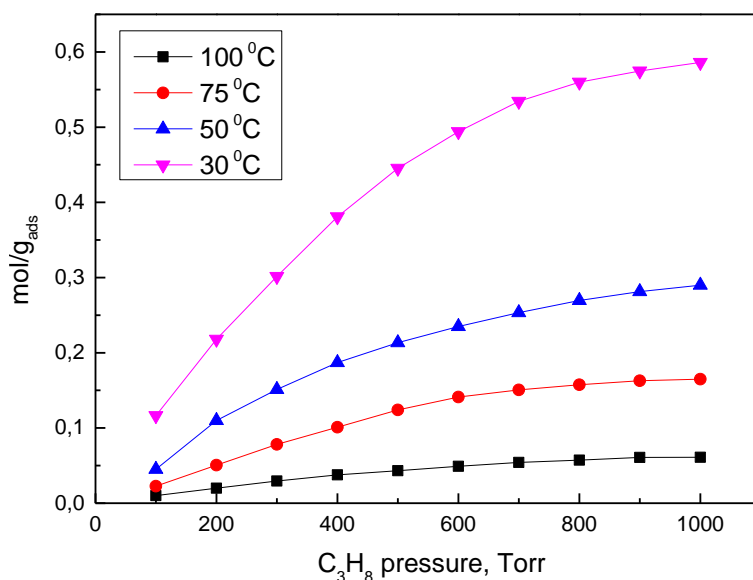


Рисунок 5.13. Ізотерми пропанової адсорбції

З рис.5.13 видно, що при кожному значенні температури ізотерми адсорбції розташовуються нижче з підвищенням температури. Крім того, при збільшенні пропанового тиску кожна з ізотерм йде до насичення (рівноваги).

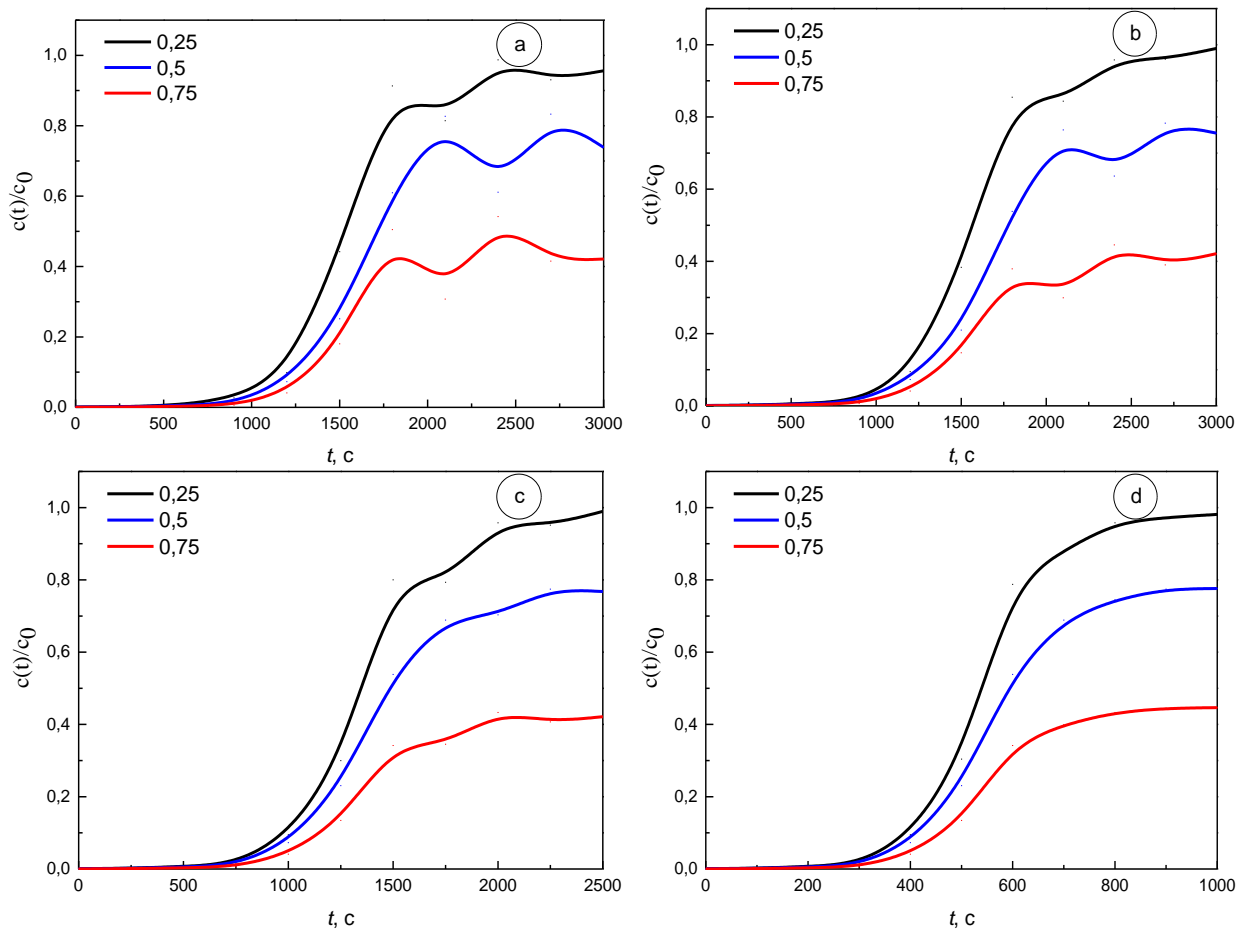


Рисунок 5.14. Залежності концентрації адсорбату в газовій фазі $c = c(t, z)$ за фіксованими значеннями z ($z/z_0 = 0,25; 0,5; 0,75$), розрахованими при температурі $20\text{ }^{\circ}\text{C}$ (a), $50\text{ }^{\circ}\text{C}$ (б), $100\text{ }^{\circ}\text{C}$ (c), $300\text{ }^{\circ}\text{C}$ (d)

З використанням розвиненої теорії, застосовуючи залежності (5.142), (5.145), (5.150) виконувались розрахунки концентрацій адсорбату у газоподібній фазі. На Рис. 5.14 а, б, с, d приведено залежності розрахованих величин концентрації $c = c(t, z)$ від часу для фіксованих значень геометричних розмірів досліджуваного зразка та фіксованих значень температури 20°C , 50°C , $100\text{ }^{\circ}\text{C}$, $300\text{ }^{\circ}\text{C}$, за якої відбуваються адсорбативні процеси.

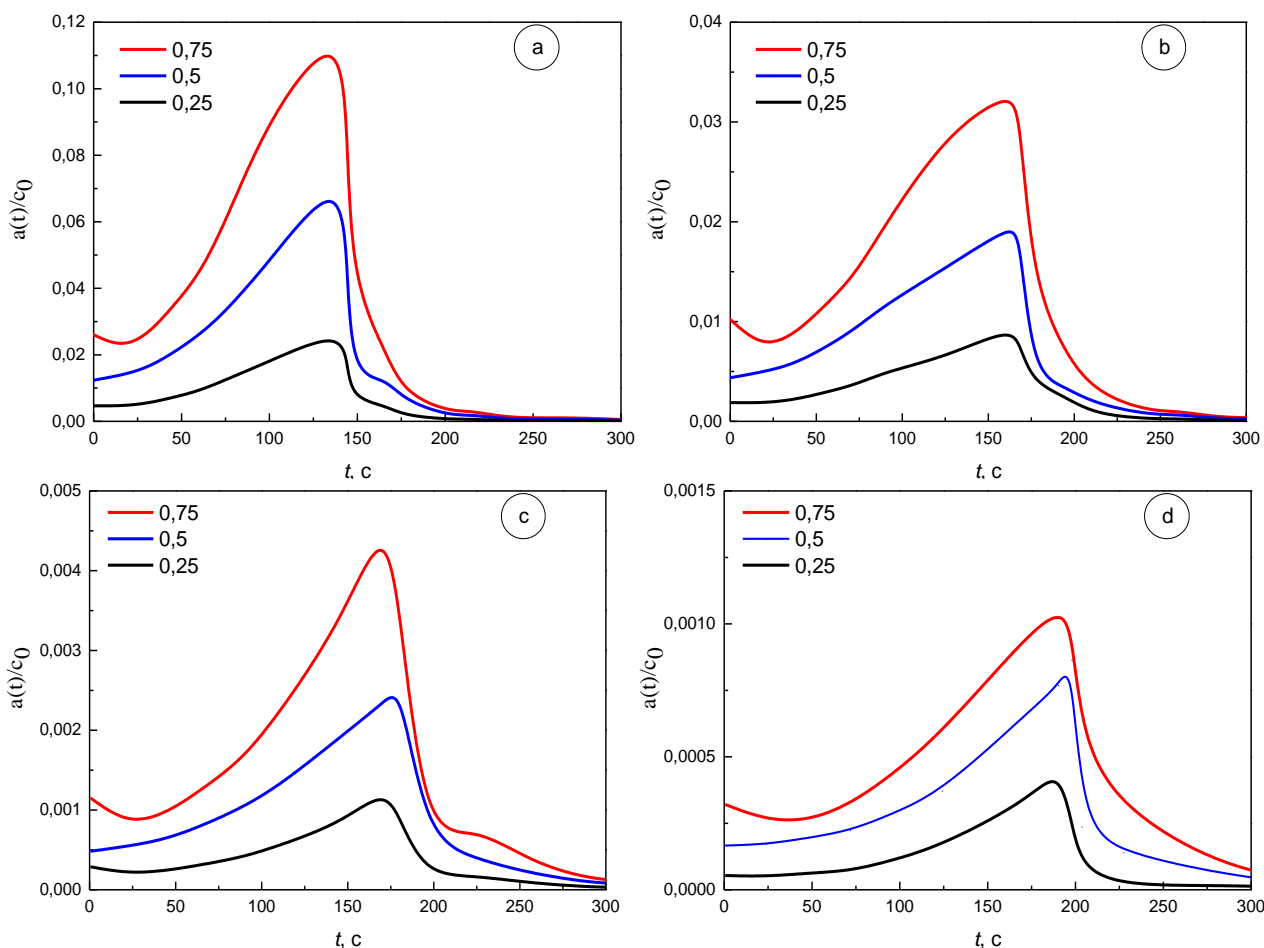


Рисунок 5.15. Залежність концентрації в порах адсорбенту $a = a(t, z)$ при фіксованих значеннях z ($z/z_0 = 0,25; 0,5 : 0,75$), розрахованих при температурі 20°C (а), 50°C (б), 100°C (с), 300°C (г) .

Як видно з розрахованих залежностей від часу t , їх загальний характер є якісно однаковим: для кожного з значень z/z_0 значення концентрації адсорбату $c(t)/c_0$ зростають. При цьому на графіках Рис. 5.14 а, б, с можна спостерігати незначне зменшення концентрації адсорбату, а далі його концентрація збільшується, виходячи на насичення. Слід зауважити, що з ростом температури виявлений ефект стає все менш вираженим. Поява цього ефекту пов'язана з тим, що при малій температурі молекули відштовхуються одна від одної, як це видно зі співвідношення Леонарда-Джонса, що спричиняє часткове вивільнення нанопорами адсорбату частини адсорбованих молекул. З ростом ж температури сили відштовхування між молекулами слабшають, і згаданий ефект стає слабовираженим. Також слід зауважити, що швидкість росту концентрації адсорбату у газовій фазі сильно залежить від температури: вона швидко зростає з її ростом.

На Рис. 5.15 а, б, с, д приведено результати розрахунку концентрації адсорбованої речовини з газової фази у нанопорах адсорбату. Розрахунки було

виконано у залежності від часу t для аналогічних геометричних параметрів досліджуваного зразка та значень z та температури, при яких отримано залежності, приведені на Рис. 3 а, b, c, d.

Як видно з аналізу приведених на Рис. 5.15 а, b, c, d залежностей, їх графіки мають одну характерну особливість: у кожному з графіків зі зміною часу формується похиле плато, пов'язане зі зростанням концентрації у порах адсорбенту. Після досягнення ж максимуму у кожній з концентраційних залежностей формується вертикальна стінка, що з фізичної точки зору визначає діапазон часу, за який нанопори втрачають захоплений леткий адсорбат. Слід також зауважити, що попри схожість отриманих залежностей, з ростом температури концентрація $a(t)$ у порах адсорбенту різко зменшується. Крім того максимуми кожної з залежностей з ростом температури зміщуються у шкалі часу вправо, проте, як видно з рисунків зменшення концентрації відбувається протягом також самого інтервалу часу.

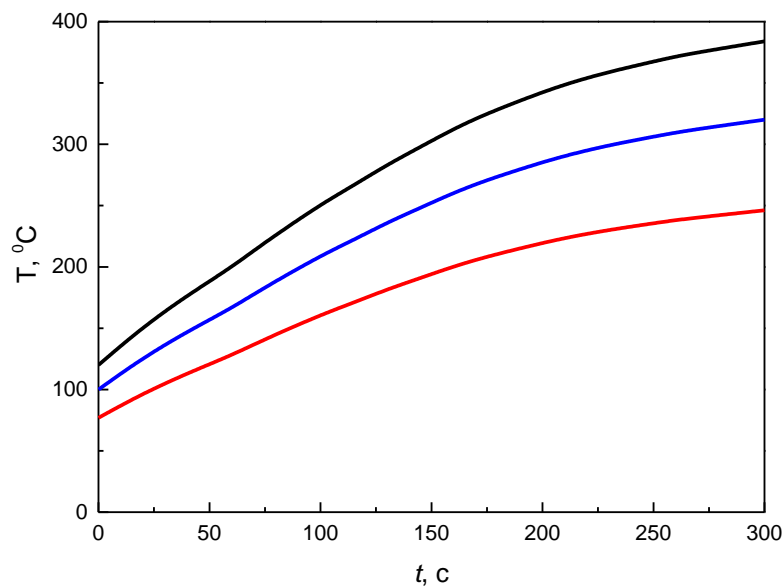


Рисунок 5.16. Залежність температури всередині зразка $T = T(t, z)$ від часу за фіксованими значеннями z ($z/z_0 = 0,25; 0,5; 0,75$)

Також, як видно з Рис. 5.16 на процес істотно впливає зростання температури усередині досліджуваного зразка. Співставляючи графіки Рис. 5.15 а, b, c, d і Рис. 5.16 видно, що процес поглинання нанопорами адсорбенту відбувається в проміжку від 50 с до 200 с, при цьому температура всередині досліджуваного зразка змінюється в середньому від 100 °C до 320 °C.

Список джерел до розділу 5

1. Unger N., Bond T.C., Wang J.S., Koch D.M., Menon S., Shindell D.T., Bauer S. Attribution of climate forcing to economic sectors, *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 2010, 107(8), 3382-7.
2. Euro 5 and Euro 6 standards: reduction of pollutant emissions from light vehicles. Available at: uropa.eu/legislation_summaries/environment/air_pollution/128186_es.htm (May 5, 2010).
3. Ballinger T.H., Anderson P.J. Hydrocarburation trap/catalyst for reducing cold-cast emission from internal combustion engines. US Patent 6617276 B1, 2003.
4. Puertolas B., Navarro M.V., Lopez J.M., Murillo R., Mastral A.M., Garcia T. Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite / *Separation and Purification Technology* 86 (2012) 127–136
5. Szczygiel J., Szyja B. Diffusion of hydrocarburations in the reforming catalyst: molecular modeling. *J. Mol. Graphics. Modell.* 22 (2004) 231-239.
6. V.B. Kanzanski, Adsorbed carbocations as transition states in heterogeneous acid catalyzed transformations of hydrocarbons, *Catal. Today* 51 (1999) 419–434.
7. Hussain I., Titiloye J.O., Molecular dynamics simulations of the adsorption and diffusion behaviour of pure and mixed alkanes in silicalite, *Microporous Mesoporous Mater.* 85 (2005) 143–156.
8. L. Song, Z.-L. Sun, H.-Y. Ban, M. Dai, L.V.C. Rees, Studies of unusual adsorption and diffusion behaviour of benzene in silicalite-1, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 6 (2004) 4722–4731
9. J. Szczygiel, B. Szyja, Adsorption equilibria of hydrocarbons in the structure of the reforming catalyst: molecular modelling, *J. Mol. Graphics Modell.* 25 (2006) 116–125.
10. Barrer, R.M., *Diffusion and Flow in Porous Zeolite, Carbon or Ceramic Media, Characterization of Porous Solids*, Society of Chemical Industry, London, 1979
11. J. Haugaard, H. Livbjerg, Models of pore diffusion in porous catalysts, *Chem. Eng. Sci.* 53 (16) (1998) 2941–2948.
12. H. Qinglin, S.M. Sundaram, S. Farooq, Revisiting transport of gases in the micropores of carbon molecular sieves, *Langmuir* 19 (2) (2003) 393–405.
13. Eic M., Ruthven D.M. A new exoerimental technique for measuerement of intracrystalline diffusivity , *Zeolites* 8 (1988) 49-45.
14. A. Baiker, M. New, Determination of macropore diffusion in molecular sieve particles by pulse gas chromatography, *J. Chromatogr.* 238 (1982) 13–28.
15. S. Bhatia, A.Z. Abdullah, C.T. Wong, Adsorption of butyl acetate in air over silver-loaded Y and ZSM-5 zeolites: experimental and modelling studies, *J. Hazard. Mater.* 163 (2009) 73–81.
16. W. Fei, W. Wenchuan, H. Shiping, T. Jiawei, X. Zaiku, Experiment and modeling of pure and binary adsorption of n-butane and butene-1 on ZSM-5 zeolites with different Si/Al ratios, *Chin. J. Chem. Eng.* 15 (3) (2007) 376–386.
17. M. Labaki, M. Issa, S. Smeeckens, S. Heylen, C.E.A. Kirschhock, K. Villani, M.Jeguirima, D. Habermachera, J.F. Brilhaca, J.A. Martens, Modeling of NO_x adsorption–desorption–reduction cycles on a ruthenium loaded Na–Y zeolite, *Appl. Catal., B* 97 (2010) 13–20.
18. López J.M., Navarro M.V., Garcia T., Murillo R., Mastral A.M., Varela-Candia F.J., Lozano-Castello D., Bueno-López A., Cazola-Amoros D. Screening of different zeolites and silicoaluminophosphates for the retention of propene under cold start conditions. *Microporous Mesoporous Mater.* 130 (2010) 239-247.

19. R.M. Heck, R.J. Farrauto, Catalytic Air Pollution Control. Commercial Technology, second ed., Wiley-Interscience, New York, 2002.
20. N.R. Burke, D.L. Trimm, R.F. Howe, The effect of silica:alumina ratio and hydrothermal ageing on the adsorption characteristics of BEA zeolites for cold start emission control, *Appl. Catal.*, B 46 (2003) 97–104.
21. A. Iliyas, M.H. Zahedi-Niaki, M. Eic, S. Kaliaguine, Control of hydrocarbon coldstart emissions: a search for potential adsorbents, *Microporous Mesoporous Mater.* 102 (2007) 171–177.
22. S.W. Baek, J.R. Kim, S.K. Ihm, Design of dual functional adsorbent/catalyst system for the control of VOC's by using metal-loaded hydrophobic Y-zeolites, *Catal. Today* 93–95 (2004) 575–581.
23. Iliyas, H.M. Zahedi-Niaki, M. Eic, One-dimensional molecular sieves for hydrocarbon cold-start emission control: influence of water and CO₂, *Appl. Catal. A* 382 (2010) 213–219.
24. Kärger J. and Ruthven D. Diffusion in Zeolites and Other Microporous Solids, John Wiley & Sons, New York, 1992. 605 p.
25. Sergienko I., Petryk M., Khimith O.N., Mykhalyk D., Leclerc S., Fraissard J. Mathematical Modelling of Diffusion Process in Microporous Media (Numerical analysis and application). National Academy of Sciences of Ukraine. Kyiv, 2014, 196 p.
26. Petryk M., Parafeinyk V., Kruchnevych T., Zeria A. The gas dehydration block of NGV filling stations BCV 250. *Chemical Technology. Naukova Dumka*. Vol. 6, 1988, 59-61.
27. Petryk M. Mathematical Modeling of Nonlinear Non-isothermic Process of Diffusion and Adsorption in Compressed Layer of Adsorbent. *Integral Transformations and Application in Boundary Problems. Bulletin of Institute of Mathematics. National Academy of Sciences of Ukraine*. Kyiv, Vol. 6, 1994, 151-164.
28. Chen, N.Y., Degnan T.F. and Smith M.C. Molecular Transport and Reaction in Zeolites: Design and Application of Shape Selective Catalysis. – New York, Wiley-
29. Heaviside O. Electromagnetic Theory. The Electrician. Vo1. 1-3. London, E.C. 1893.
30. Lavrentiev M.A., Shabat B.V. Methods of theory of functions of a complex variable. M.: Nauka, 1973, 736 p.
31. Unger, N., Bond, T.C., Wang, J.S., Koch, D.M., Menon, S., Shindell, D.T., Bauer, S.:
32. Attribution of climate forcing to economic sectors, *Proc. Natl. Acad. Sci.* 107(8), 3382-3387(2010)
33. Euro 5 and Euro 6 standards: reduction of pollutant emissions from light vehicles. http://europa.eu/legislation_summaries/environment/air_pollution/128186_es.htm (2010). Accessed 5 May 2010
34. Farag, H.A., Ezzat, M.M., Amer, H., Nashed, A.W.: Natural gas dehydration by desiccant materials. *Alexandria Engineering Journal*. 50 (4), 431–439 (2010)
35. Gandhidasan, P., Al-Farayedhi, A.A., Al-Mubarak, A.A.: Dehydration of natural gas using solid desiccants. *Energy*. 26, 855–868 (2001)
36. Karimi, A., Abdi, M.A.: Selective dehydration of high-pressure natural gas using supersonic nozzles. *Chemical Engineering and Processing*. 48, 560–568 (2009)
37. Bahadori, A., Mokhatab, S.: Simple correlation accurately predicts densities of glycol solutions. *Petroleum Science and Technology*. 27, 325–30 (2009)
38. Netusil, M., Pavel, D.: Comparison of three methods for natural gas dehydration. *Journal of Natural Gas Chemistry*. 20(5), 471–76 (2011)

39. Puertolas, B., Navarro, M.V., Lopez, J.M., Murillo, R., Mastral, A.M., Garcia, T.: Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite. *Separation and Purification Technology*. 86,127-36 (2012)
40. Petryk, M., Parafeinyk, V., Kruchnevytch, T., Zeria, A.: The gas dehydration block of NGV filling stations BCV 250. *Chemical Technology. Naukova Dumka*. 6, 59-61 (1988)
41. The Competitive Diffusion of Gases in a zeolite bed: NMR and Slice Procedure, Modelling and Identification of Parameters. / M. Petryk, S. Leclerc, D. Canet, I.V.
42. Mulero A., Cuadros F. Isosteric heat of adsorption for monolayers of Lennard-Jones fluids onto flat surfaces. *Chemical Physics*. 996, 205, 379-388.
43. Petryk M., Vorobiev E. Liquid Flowing from Porous particles During the Pressing of Biological Materials. *Computer & Chem. Eng.*, 2007, 31, 1336-1345.
44. Моделирование тепломассопереноса, адсорбции и десорбции углеводородов в нанопористых цеолит-катализаторах систем нейтрализации
45. Прудников А.П., Бричков Ю.А., Марычев О.И. Интегралы и ряды. Дополнительные главы. – М.: Наука, 1986. –800 с.

INTRODUCTION

Development of effective mathematical models for studying the kinetics of heat and mass transfer of hydrocarbons in the nano- and micro-pores of zeolite catalysts of exhaust gas neutralization systems is an important task problem, contributing to the reduction of the main sources of emissions into the atmosphere of energy production facilities and transport. Emissions of motor vehicles and thermal power facilities, the number of which is rapidly increasing, especially in large cities and industrial centers, today are the greatest threat to the environment and human health, bringing the process of global warming. The priority areas of research for the European Union's program "Horizon 2020" are now focused on the creation of safe energy systems and transport systems based on the development of new technological solutions based on new catalytic adsorption processes and nanoporous adsorption materials that can efficiently utilize harmful emissions of carbon compounds into the atmosphere these objects and achieve significant indicators of reducing global warming.

The methodology for modeling the adsorption, desorption of hydrocarbon compounds in nanoporous and heterogeneous structures of neutralization systems of exhaust gases, which is described by nonclassical nonlinear boundary value problems is described in the monograph.

The physical basics and thermodynamics of adsorption and desorption processes with respect to their use for constructing new mathematical models describing technological nanoproceses for the adsorption and desorption of hydrocarbon compounds in nanoporous structures for exhaust gas neutralization systems is described in the first and second sections. The necessary mathematical models of the studied objects should be formed on the basis of fundamental processes and technologies in the field of nanotechnologies, in particular, the nonlinear theory of the Langmuir and Gibbs adsorption equilibrium, the activation energy and the Lenard-Jones potential, taking into account the influence of nano- and macro-transfer flows, porosity, tunnel effect, structure of microporous particles, multicomponent properties, anisotropy of materials properties, taking into account the influence of impurities in the case of competing diffusion and other important determining physical factors.

Methods of mathematical modeling in problems of diffusion mass transfer and adsorption in homogeneous and inhomogeneous multisyllabic nanoporous media on the basis of our computational schemes for realizing the Fourier, Bessel, and Hankel integral transforms for inhomogeneous planar and cylindrical media is presented in the third section.

The fourth section is devoted to the development of methods for mathematical modeling and computational procedures, including parallelization of computations in modeling problems of equilibrium susceptibility diffusion and adsorption in inhomogeneous multicomponent cylindrical nanoporous media using the Heaviside operation method and the Laplace integral transformation.

In the fifth section, based on the developed methods of linearization on small parameter the nonlinear boundary value problems of adsorption, using the Heaviside operation method, the Laplace integral transforms of the Cauchy and Green function methods, high-performance and high-speed analytical solutions of the linearized nonisothermal adsorption and desorption problems for an arbitrary n -th approximation are constructed. The proposed approach makes it possible to efficiently implement the visually productive procedures of parallelizing computations in the simulation of the specified tasks and processes and the identification of their parameters.

The obtained theoretical and practical results include qualitative estimates of the distribution of concentration and temperature fields for the cyclic phases of adsorption and desorption of real processes (adsorption of propane and water vapor), constructed adsorption isotherms for ZSM-5 zeolite, are confirmed by numerous experiments and comparison with experimentally obtained results.

TABLE OF CONTENT

INTRODUCTION

CHAPTER 1. PHYSICAL PRINCIPLES OF ADSORPTION AND DESORPTION

- 1.1. Adsorption and chemisorption
- 1.2. Strengths and energy of adsorption
 - 1.2.1. Dispersion-repulsion energy
 - 1.2.2. Electrostatic energies
 - 1.2.2. Heat of adsorption in the first approximation
- 1.3. Theoretical calculations of the heat of adsorption
 - 1.3.1. Non-polar adsorbents
 - 1.3.2. Zeolites
 - 1.3.3. The magnitude of the relative influence of electrostatic energy and scattering energy
- 1.4. Adsorption at a low level: Henry's law
 - 1.4.1. Theoretical calculation of Henry's constants
 - 1.4.2. Limited rotation
- 1.5. Single and multilayer adsorption
 - 1.5.1. Langmuir isotherm
 - 1.5.2. BET isotherm

CHAPTER 2. ADSORPTION THERMODYNAMICS

- 2.1. Thermodynamics of the adsorbed phase
 - 2.1.1. Expansion pressure
 - 2.1.2. The Gibbs adsorption isotherm
- 2.2. Obtaining isotherm equations from the Gibbs equation
 - 2.2.1. Henry's rule
 - 2.2.2. Langmuir isotherm
 - 2.2.3. Wolmer isotherm
 - 2.2.4. Van der Waals isotherm
 - 2.2.5. Virial isotherm

2.3. Adsorption of mixtures

2.3.1. The Myers and Prausnitz approach

2.3.2. Theory of vacancy solutions

2.4. Statistical thermodynamic approach

2.4.1. Elementary statistical definition of the Langmuir isotherm

2.4.2. Application "Functions of the grand canonical distribution"

2.4.3. A simple statistical model of isotherms for zeolites

2.5. Correlation, analysis and forecast of adsorption equilibrium

2.5.1. Localized adsorption

2.5.2. Deviation from the ideal Langmuir model

2.5.3. . General statistical correlation

CHAPTER 3. METHODS OF MATHEMATICAL MODELING IN PROBLEMS OF DIFFUSION MASS TRANSFER AND ADSORPTION IN HOMOGENEOUS AND INHOMOGENEOUS MULTILAYERED NANOPOROUS MEDIA

3.1. Finite integral Fourier transforms for homogeneous transport media

3.1.1. Finite integral Fourier transforms for bounded transport media

3.1.2. Integral Fourier transforms for semibounded homogeneous transport media

3.2. Finite integral Fourier transforms for bounded inhomogeneous n-components of transport media

3.3. Finite Fourier integral transforms for semibounded inhomogeneous n-components of transport media

3.4. Finite integral Fourier transforms for unbounded inhomogeneous transport media

3.5. Hankel type finite integral transformations of for homogeneous cylindrical transport media

3.6. Finite hybrid integral transformations of Hankel type of the second in for bounded inhomogeneous n-components of cylindrical media with a symmetrical semipermeable cavity

3.7 Hybrid integral transforms of the Fourier-Bessel type for bounded two-syllable cylindrical transfer media

3.8. Hybrid integral transforms of Fourier-Bessel type for unbounded inhomogeneous n-components of cylindrical transport media

- 3.9. Weber type hybrid integral transforms of for unbounded homogeneous cylindrical media with a symmetric cavity
- 3.10. Modeling of mass transfer systems in multidimensional and heterogeneous in several directions
- 3.11. Modeling of inhomogeneous B-parabolic mass transfer problems with generalized boundary and interface conditions for cylindrical multicomponent media
- 3.12. Two-dimensional cylindrical nonhomogeneous problem of multicomponent transfer systems

CHAPTER 4. METHODS OF MATHEMATICAL MODELING IN PROBLEMS FOR EQUILIBRIUM DIFFUSION AND ADSORPTION PROCESSES IN INHOMOGENEOUS MULTICOMPONENT CYLINDRICAL NANOPOROUS ENVIRONMENTS

- 4.1. Methodology for constructing solutions of boundary value problems of adsorption in bounded inhomogeneous cylindrical nanoporous environments
 - 4.1.1. The formulation of the nonlinear boundary value problem of adsorption in non-uniform cylindrical nanoporous medium
 - 4.1.2. The linearization scheme for a nonlinear cylindrical model
 - 4.1.3. The construction of the solution of the linearized system of the problem
- 4.2. Methodology for constructing of the solutions for boundary-value adsorption problems in bounded inhomogeneous cylindrical nanoporous environments with a symmetric cavity
- 4.3. Methodology for constructing solutions of boundary value problems of adsorption in unbounded inhomogeneous cylindrical nanoporous environments
- 4.4. Method for constructing solutions of boundary value problems of adsorption in unbounded inhomogeneous cylindrical nanoporous environments with a symmetrical cavity

CHAPTER 5. MODELING OF NONLINEAR NONISOTHERMAL PROCESSES ADSORPTION AND DESORPTION OF HYDROCARBONS IN NANOPOROUS CATALYTIC SYSTEMS

- 5.1. Modeling of heat and mass transfer, adsorption and desorption hydrocarbons in nanoporous zeolite catalyst systems exhaust gas neutralization
 - 5.1.1. Mathematical model of cyclic phases of nonisothermal absorption and desorption in a medium of nanoporous particles

- 5.1.2. Construction of an analytical model solution
- 5.1.3. Computer modeling and process of adsorption and desorption in zeolite-catalyst systems exhaust gas neutralization parameters analysis
- 5.1.4. Dehydration of natural gas as motor fuel micropores of the adsorbent. Research and simulation of phases adsorption and desorption
- 5.2. Modeling of adsorption and desorption of hydrocarbons in nanoporous catalysts of neutralization systems exhaust gases using a Langmuir nonlinear isotherm
 - 5.2.1. Non-linear mathematical model of non-isothermal adsorption and desorption in a medium of nanoporous particles
 - 5.2.2. The linearization scheme for a nonlinear model
 - 5.2.3. The method of constructing analytical solutions of heterogeneous boundary-value problem of zeroth approximation
 - 5.2.4. The method of constructing analytical solutions of heterogeneous boundary value problems of the n-th approximation
- 5.3. Modeling of adsorption and desorption of hydrocarbons in nanoporous catalytic zeolite media with taking into account the nonlinear Langmuir isotherm and energy activation of adsorbent
 - 5.3.1. Nonlinear mathematical model of nonisothermal adsorption and desorption based on the generalized Langmuir isotherm
 - 5.3.2. The linearization scheme for a nonlinear model
 - 5.3.3. The method of constructing analytical solutions of heterogeneous boundary-value problem of zeroth approximation
 - 5.3.4. Method for constructing the analytical solutions to heterogeneous problems
 - 5.3.5. Computer modelling. Analysis of concentration distributions adsorptive in the gas phase and nanopores of zeolite and temperatures